

Fernanda Coff Dias

**Simulação direta de Monte Carlo de ondas de  
choque com base no potencial *ab initio***

Curitiba

2016

Fernanda Coff Dias

**Simulação direta de Monte Carlo de ondas de choque  
com base no potencial *ab initio***

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Física, no Curso de Pós-Graduação em Física, Setor de Ciências Exatas, da Universidade Federal do Paraná.

Universidade Federal do Paraná

Orientador: Felix Sharipov

Curitiba

2016

---

D541s

Dias, Fernanda Coff

Simulação direta de Monte Carlo de ondas de choque com base no potencial ab initio/ Fernanda Coff Dias. – Curitiba, 2016.  
85 f. : il. color. ; 30 cm.

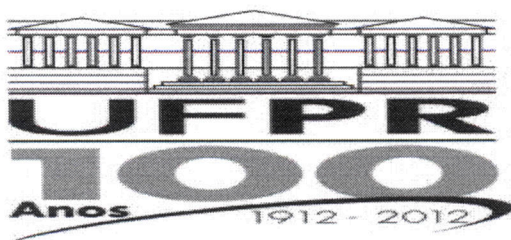
Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas,  
Programa de Pós-graduação em Física, 2016.

Orientador: Felix Sharipov .  
Bibliografia: p. 77-81.

1. Ondas de choque - Modelos matemáticos. 2. Química - Programas de computador. 3. Método de Monte Carlo. I. Universidade Federal do Paraná. II.Sharipov, Felix. III. Título.

CDD: 531.1133

---



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Fone: (41) 3361-3096 Fax: (41) 3361-3418  
E-mail: [posgrad@fisica.ufpr.br](mailto:posgrad@fisica.ufpr.br)

## PARECER


Os abaixo-assinados, membros da banca examinadora de Defesa de Dissertação de Mestrado da aluna **FERNANDA COFF DIAS**, consideram aprovada a redação final da dissertação, cujo título é: “*Simulação Direta de Monte Carlo de Ondas de Choque com base no Potencial ab initio*”.

Curitiba, 19 de fevereiro de 2016.

### Banca Examinadora

### Assinatura

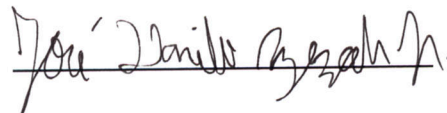
Prof. Dr. Felix Sharipov (UFPR)

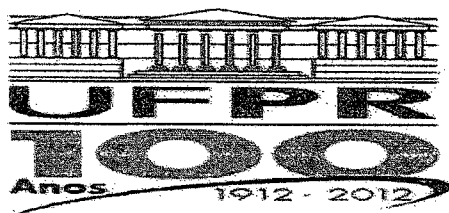
  
\_\_\_\_\_

Prof. Dr. Ricardo Luiz Viana (UFPR)

  
\_\_\_\_\_

Prof. Dr. José Danilo Szezech Junior (UEPG)

  
\_\_\_\_\_



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Fone: (41) 3361-3096 Fax: (41) 3361-3418  
E-mail: [posgrad@fisica.ufpr.br](mailto:posgrad@fisica.ufpr.br)

## ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

*"Simulação Direta de Monte Carlo de Ondas de Choque com  
base no Potencial ab initio".*

ALUNA

FERNANDA COFF DIAS

Em sessão pública iniciada às nove horas e trinta minutos do dia 19 de fevereiro de 2016, após um seminário sob o título acima e posterior arguição, esta banca examinadora decidiu APROVA a candidata com o conceito global A.

Banca Examinadora

Assinatura

Conceito

Prof. Dr. Felix Sharipov  
(UFPR)

A

Prof. Dr. Ricardo Luiz Viana  
(UFPR)

A

Prof. Dr. José Danilo Szezech Junior  
(UEPG)

A

# Agradecimentos

Agradeço ao CNPq pela bolsa de pesquisa, e ao meu orientador Felix Sharipov pelo suporte e orientação.

Esse trabalho foi parcialmente financiado pela FINEP através dos projetos CT-INFRA/UFPR.

# Resumo

Neste trabalho foram obtidas as estruturas de ondas de choque unidimensionais em gases monoatômicos diluídos, utilizando a simulação direta de Monte Carlo, para um amplo espectro de números de Mach. Foram realizados cálculos para os potenciais de interação intermolecular de esferas rígidas e para os potenciais *ab initio* para o hélio e o argônio. Os potenciais *ab initio* são potenciais realísticos, obtidos a partir de princípios físicos básicos, que não fazem uso de dados experimentais para sua resolução. Resultados para a inclinação máxima dos perfis das propriedades termodinâmicas do gás são apresentados, para números de Mach do escoamento supersônico entre 1,1 e 10. O uso do potencial *ab initio* permitiu que os resultados fossem obtidos sem o uso de parâmetros de ajuste a dados experimentais, com um erro estatístico menor que 0,5%.

**Palavras-chave:** ondas de choque, potencial *ab initio*, inclinação de ondas de choque.

# Abstract

In this work the structure of one-dimensional shock waves in monatomic dilute gases were computed applying the direct simulation Monte Carlo method for a wide range of Mach number. Calculations were carried out for hard spheres interatomic potential and *ab initio* potential for argon and helium. The *ab initio* potential are realistic potentials obtained from basic physical principles, without any data from experiments. Results for the maximum slope of the thermodynamic properties of the gas are given for upstream Mach numbers between 1.1 and 10. The *ab initio* potential allows the results to be obtained without the use of any experimental data with the numerical error less than 0.5%.

**Keywords:** shock wave, *ab initio* potential, slope of shock waves.



# Lista de ilustrações

Figura 1 – Onda de choque normal no referencial da onda. . . . .	20
Figura 2 – Tubo de choque. . . . .	20
Figura 3 – Logaritmo das razões entre as propriedades do gás em função do número de Mach $M_1$ , para $\gamma = 5/3$ . . . . .	25
Figura 4 – Perfil típico de uma propriedade termodinâmica $y$ em uma onda de choque. $L$ é a espessura da onda. . . . .	27
Figura 5 – Modelos de potenciais de interação intermolecular: (a) Potencial de esferas rígidas; (b) Potencial de Sutherland ( $\nu = 6$ ); (c) Potencial de centros de repulsão ( $\nu = 7, k = 1$ ); (d) Potencial de Lennard-Jones. . .	33
Figura 6 – Potencial interatômico $U$ em função da distância intermolecular $r$ para o argônio, equações (2.69) e (2.71). . . . .	37
Figura 7 – Esquema de colisão binária onde $\chi$ é o ângulo de deflexão e $b$ é o parâmetro de impacto. . . . .	38
Figura 8 – Configuração dos parâmetros iniciais. . . . .	51
Figura 9 – Fronteira aberta através da qual ocorre fluxo de partículas. . . . .	52
Figura 10 – Campo de densidade do argônio para os potenciais <i>ab initio</i> (AI) e esferas rígidas (HS). . . . .	62
Figura 11 – Campo de temperatura do argônio para os potenciais <i>ab initio</i> (AI) e esferas rígidas (HS). . . . .	63
Figura 12 – Campo de velocidade do argônio para os potenciais <i>ab initio</i> (AI) e esferas rígidas (HS). . . . .	64
Figura 13 – Pontos calculados e a curva de ajuste para a densidade adimensional, $M_1 = 2$ . . . . .	66
Figura 14 – Inclinação da curva de densidade, $D_\rho$ , em função do número de Mach $M_1$ para o argônio com base no potencial <i>ab initio</i> (AI) e para o potencial de esferas rígidas (HS). . . . .	68
Figura 15 – Inclinação da curva de densidade, $D_\rho$ , em função do número de Mach $M_1$ para o hélio com base no potencial <i>ab initio</i> (AI) e para o potencial de esferas rígidas (HS). . . . .	69

# Lista de tabelas

Tabela 1 – Classificação do escoamento de acordo com o número de Mach. . . . .	19
Tabela 2 – Parâmetros do potencial <i>ab initio</i> para o hélio, equação (2.70), onde $a_0 = 5,29177249 \times 10^{-11}$ m é o raio de Bohr. Fonte: [12]. . . . .	36
Tabela 3 – Parâmetros do potencial <i>ab initio</i> para o argônio, equação (2.71). Fonte: [16]. . . . .	37
Tabela 4 – Valores para os parâmetros da matriz $\chi_{ij}$ , $T_1 = 300$ K. . . . .	56
Tabela 5 – Valores finais para os parâmetros do escoamento. Os demais valores são $N = 10^7$ , $\Delta t = 0,002\ell/v_{mp}$ e $NC = 1000$ . $T_1 = 300$ K. . . . .	59
Tabela 6 – Inclinação máxima adimensional dos perfis de densidade para os potenciais HS e AI para o hélio (He) e o argônio (Ar). . . . .	66
Tabela 7 – Inclinação máxima adimensional dos perfis de velocidade para os potenciais HS e AI para o hélio (He) e o argônio (Ar). . . . .	67
Tabela 8 – Inclinação máxima adimensional dos perfis de temperatura para os potenciais HS e AI para o hélio (He) e o argônio (Ar). . . . .	67
Tabela 9 – Influência do valor de $N_b$ e $N_E$ , para o argônio. . . . .	70
Tabela 10 – Influência do valor de $N_b$ e $N_E$ , para o hélio. . . . .	71
Tabela 11 – Influência do valor da energia adimensional máxima, $E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1)$ , no valor da inclinação das curvas de densidade, $D_\rho$ , para o argônio. . . . .	72
Tabela 12 – Influência do valor da energia adimensional máxima, $E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1)$ , no valor da inclinação das curvas de densidade, $D_\rho$ , para o hélio. . . . .	73
Tabela 13 – Influência do número de partículas, $N$ , no valor da inclinação máxima das curvas de densidade, $D_\rho$ . . . . .	73
Tabela 14 – Influência do número de células, $NC$ , no valor da inclinação máxima das curvas de densidade, $D_\rho$ . . . . .	74
Tabela 15 – Influência do intervalo de tempo adimensional, $\Delta t$ , no valor da inclinação máxima das curvas de densidade, $D_\rho$ . . . . .	74
Tabela 16 – Influência do tamanho adimensional característico do escoamento, $x/\ell$ , no valor da inclinação máxima das curvas de densidade, $D_\rho$ . . . . .	75
Tabela 17 – Propriedades termodinâmicas através da onda de choque para $M_1 = 2$ , para os potenciais de esferas rígidas (HS) e <i>ab initio</i> (AI) para o argônio. . . . .	83
Tabela 18 – Propriedades termodinâmicas através da onda de choque para $M_1 = 5$ , para os potenciais de esferas rígidas (HS) e <i>ab initio</i> (AI) para o argônio. . . . .	84
Tabela 19 – Propriedades termodinâmicas através da onda de choque para $M_1 = 10$ , para os potenciais de esferas rígidas (HS) e <i>ab initio</i> (AI) para o argônio. . . . .	85

# Lista de abreviaturas

AI	<i>ab initio</i> (potencial)
BGK	(modelo) Bhatnagar, Gross and Krook
DSMC	Direct Simulation Monte Carlo (Simulação direta de Monte Carlo)
HS	hard spheres (potencial esferas rígidas)
LJ	(potencial) Lennard-Jones
VHS	variable hard spheres (potencial esferas rígidas variáveis)
VSS	variable soft spheres (potencial esferas macias variáveis)
NC	número de células

# Lista de símbolos

$a$	velocidade do som, eq. (2.1)
$b$	parâmetro de impacto
$b_{m\acute{a}x}$	parâmetro de impacto limite
$c_p$	calor específico à pressão constante
$c_v$	calor específico a volume constante
$d$	diâmetro molecular
$D$	inclinação máxima dos perfis das ondas de choque, eq. (2.41)
$e$	energia interna específica
$E_r$	energia cinética do movimento relativo, eq. (2.74)
$f$	função de distribuição de velocidades
$f^M$	função Maxwelliana de distribuição de velocidades, eq. (2.59)
$F$	função de distribuição acumulada, eq. (4.3)
$F_N$	representação das moléculas modelo, eq. (4.1)
$\mathbf{G}$	velocidade do centro de massa, eq. (4.41)
$\mathbf{g}_r$	velocidade relativa
$h$	entalpia
$\mathbf{I}$	tensor identidade
$J$	fluxo de partículas, eq. (4.21)
$k_B$	constante de Boltzmann, $k_B = 1,3806488(13) \times 10^{-23}$ J/K
$\ell$	caminho médio equivalente, eq. (2.38)
$L$	espessura da onda de choque, Fig. 4
$M$	número de Mach, eq. (2.6)
$\mathcal{M}$	peso molecular

$m$	massa de uma molécula
$n$	densidade numérica
$N_{col}$	número de colisões por célula entre partículas reais, eq. (4.34)
$N_{colM}$	número de colisões por célula entre partículas modelo, eq. (4.36)
$N_e$	fluxo molecular, eq. (4.26)
$N_R$	número de partículas reais
$p$	pressão
$\mathbf{P}$	tensor pressão
$\mathbf{q}$	vetor fluxo de calor
$\mathbf{r}$	vetor posição
$r$	distância intermolecular
$R_f$	número aleatório entre 0 e 1
$s$	entropia
$\mathbf{S}$	tensor taxa de cisalhamento, eq. (2.48)
$t$	tempo
$T$	temperatura
$\mathbf{u}$	velocidade hidrodinâmica
$U$	potencial intermolecular
$\mathbf{v}$	velocidade molecular
$v_{mp}$	velocidade molecular mais provável, eq. (2.39)
$\mathbf{V}$	velocidade peculiar, eq. (4.9)
$V_c$	volume da célula
$\epsilon$	parâmetro de impacto azimutal
$\varepsilon$	profundidade do poço potencial
$\gamma$	razão entre os calores específicos, eq. (2.3)
$\kappa$	coeficiente de condutividade térmica

$\lambda$	livre caminho médio, eq. (2.36)
$\mu$	coeficiente de viscosidade
$\rho$	densidade
$\sigma_t$	seção de choque total, eq. (2.37)
$\boldsymbol{\sigma}$	tensor viscosidade
$\nu$	frequência de colisão, eq. (4.33)
$\chi$	ângulo de deflexão, Fig. 7

# Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>15</b>
<b>2</b>	<b>CONCEITOS BÁSICOS</b>	<b>18</b>
2.1	Ondas de choque normais	19
2.2	Leis de conservação	21
2.3	Relações de Rankine-Hugoniot	22
2.4	Estrutura das ondas de choque	24
2.5	Dinâmica dos Gases	28
2.5.1	Mecânica dos meios contínuos	28
2.5.2	Teoria Cinética dos Gases	30
2.6	Potencial Intermolecular	32
2.6.1	Potencial de Esferas rígidas (HS)	32
2.6.2	Potencial de centros de repulsão	34
2.6.3	Potencial de Lennard-Jones (LJ)	35
2.6.4	Potencial <i>ab initio</i> (AI)	35
2.7	Dinâmica de colisões binárias	38
<b>3</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>40</b>
3.1	Mecânica dos meios contínuos	40
3.2	Abordagens baseadas na teoria cinética	41
3.3	Experimentos	43
<b>4</b>	<b>METODOLOGIA</b>	<b>46</b>
4.1	Simulação Direta de Monte Carlo	46
4.2	Métodos de Amostragem	48
4.3	Amostragem das componentes da velocidade peculiar do gás em equilíbrio	49
4.4	Algoritmo	50
4.4.1	Configuração inicial do escoamento	50
4.4.2	Movimento das partículas	51
4.4.3	Indexação	53
4.4.4	Colisões intermoleculares	53
4.4.5	Cálculo das grandezas macroscópicas	57
4.5	Parâmetros da simulação	58
4.6	Erros	59

<b>5</b>	<b>RESULTADOS</b> . . . . .	<b>61</b>
<b>5.1</b>	<b>Campo de escoamento</b> . . . . .	<b>61</b>
<b>5.2</b>	<b>Inclinação máxima</b> . . . . .	<b>65</b>
<b>5.3</b>	<b>Análise de erros</b> . . . . .	<b>70</b>
<b>6</b>	<b>CONCLUSÃO</b> . . . . .	<b>76</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	<b>78</b>
	<b>APÊNDICE A – RESULTADOS NUMÉRICOS</b> . . . . .	<b>83</b>



# 1 Introdução

Ondas de choque são ondas mecânicas de amplitude finita que se formam devido à rápida compressão do fluido. A onda de choque é um fenômeno fora do equilíbrio, através do qual o gás sofre uma transição de um estado inicial para um estado final. Diferentemente das ondas acústicas, que são ondas de pequenas amplitudes, quase infinitesimais, que se propagam na velocidade local do som e não modificam o estado do meio através do qual se deslocam, as ondas de choque possuem velocidade de propagação supersônica e produzem uma mudança abrupta das propriedades termodinâmicas do meio, que ocorrem ao longo de uma distância muito pequena.

Ondas de choque podem ser observadas nos quatro estados da matéria, em gases, líquidos, plasma e mesmo em sólidos, quando são submetidos a uma pressão ou tensão a uma taxa extremamente rápida [1, 2]. Elas podem assumir diversas geometrias e existem em todas as proporções, desde microscópicas até dimensões cósmicas e são tema de estudo em muitas áreas de conhecimento como a física, a química, a engenharia, as tecnologias militares e a medicina.

No estudo dos gases, na aproximação de gases ideais, na qual os efeitos dissipativos, como viscosidade e condutividade térmica não são considerados, as ondas de choque são superfícies de descontinuidade que separam dois estados diferentes do gás. Em aproximações de ordem superior, as ondas de choque definem regiões onde as propriedades físicas do gás mudam de forma contínua, porém rapidamente. Neste caso, elas possuem uma espessura finita, da ordem do livre caminho médio molecular, isto é, da distância média percorrida por uma partícula do gás entre duas colisões intermoleculares sucessivas.

Os primeiros estudos teóricos sobre ondas de choque em fluidos datam da segunda metade do século XIX, mas foi principalmente a partir da segunda guerra mundial que cresceu o interesse prático sobre este tema. As principais motivações deste período foram o desenvolvimento de motores a jato, foguetes, mísseis e aviões supersônicos, e explosões nucleares. Conforme as velocidades vão se tornando cada vez maiores, cresce a dificuldade e a importância de bons resultados experimentais combinados a novos conhecimentos analíticos e computacionais.

O desenvolvimento da tecnologia aeroespacial exige o conhecimento preciso do escoamento de gases que ocorre externamente aos veículos espaciais. Eles entram na atmosfera com velocidades tipicamente entre 20 e 50 vezes maiores do que a velocidade do som [3]. Nestas condições, uma onda de choque cobre completamente o veículo (bow shock), e muitos fenômenos estão associados às altas energias.

Na alta atmosfera, a distância percorrida entre duas colisões por uma molécula

do gás tem a ordem de grandeza de alguns metros. Portanto, neste caso, as colisões intermoleculares podem ser ignoradas, e usa-se o regime de moléculas livres na descrição do escoamento. Na região intermediária, as colisões intermoleculares devem ser levadas em conta, pois a distância entre colisões sucessivas passa a ter a ordem de grandeza das dimensões do próprio veículo. Nesta situação, métodos de dinâmica dos gases rarefeitos devem ser utilizados. Entre eles estão os métodos que envolvem a solução da equação de Boltzmann (Subseção 2.5.2) e a simulação direta de Monte Carlo (DSMC) (Seção 4).

Em baixas altitudes, próximas à superfície da Terra, a distância média entre colisões sucessivas de uma molécula do gás é tão pequena que o gás pode ser representado por um meio contínuo. Neste caso, o estudo do escoamento é realizado com base nas equações do meio contínuo (equações de Navier-Stokes, Seção 2.5.1). No entanto, as ondas de choque possuem uma escala de comprimento da ordem do livre caminho médio molecular, logo, mesmo próximo à superfície terrestre, no que diz respeito ao estudo teórico da estrutura das ondas de choque, as equações do meio contínuo não são válidas. Neste caso, métodos de dinâmica de gases rarefeitos devem ser utilizados. Ainda assim, existem diversos estudos teóricos baseados na hipótese dos meios contínuos (por exemplo, [4, 5]), que mostram que é possível obter pelo menos o comportamento qualitativo da espessura dos choques em relação à velocidade do escoamento (Capítulo 3).

Nas primeiras missões Apollo, os resultados teóricos e experimentais escassos causaram o uso de materiais e técnicas conservadoras na fabricação das cápsulas de reentrada [6]. O uso de técnicas de simulação computacional, como a simulação direta de Monte Carlo (DSMC), é considerado um desenvolvimento recente que influenciou fortemente o design de veículos espaciais [3]. Algumas missões de exploração do sistema solar que tiveram no seu desenvolvimento o uso deste método de dinâmica dos gases rarefeitos, foram a Mars Global Surveyor, sonda espacial que operou na órbita de Marte por nove anos, e a Stardust, a primeira nave espacial com a capacidade de recolher amostras obtidas no espaço e trazê-las para a Terra, ambos da agência espacial americana (NASA). O estudo aerotermodinâmico do satélite brasileiro SARA (sigla para satélite de reentrada atmosférica) é também um exemplo de aplicação do método DSMC [7, 8].

Até este momento, no estudo da estrutura das ondas de choque, apenas modelos moleculares não realísticos eram utilizados em simulações DSMC. São exemplos o modelo de esferas rígidas e outros modelos especialmente criados para implementação neste método de simulação, como o modelo de esferas rígidas variáveis, que envolvem a utilização de alguns parâmetros de ajuste a dados experimentais. O alto custo computacional de se utilizar modelos realísticos inviabilizava a simulação.

Recentemente foi proposto um método que permite a utilização de qualquer potencial intermolecular arbitrário nas simulações DSMC com o mesmo esforço computacional dos modelos anteriores [9, 10]. Esta técnica permite a implementação de potenciais realísti-

cos, como o potencial de Lennard-Jones, que contém alguns parâmetros de ajuste a dados experimentais. Esta técnica também torna possível a utilização de potenciais *ab initio*, obtidos a partir de princípios físicos básicos e sem nenhuma informação experimental. Esses potenciais estão disponíveis na literatura para alguns gases monoatômicos e suas misturas [11, 12, 13, 14, 15, 16].

O objetivo deste trabalho é obter a estrutura interna de ondas de choque planas, para os gases monoatômicos argônio e hélio, através do método DSMC, utilizando o potencial *ab initio* de interação intermolecular. Para comparação, simulações utilizando o potencial de esferas rígidas também foram realizadas. Um parâmetro que habitualmente é usado como referência para comparação entre diferentes métodos teóricos e experimentais, é a inclinação máxima dos perfis das propriedades termodinâmicas das ondas de choque. Neste trabalho, dados de referência para este parâmetro foram calculados no intervalo de números de Mach entre 1,1 e 10.

As estruturas das ondas de choque obtidas através do uso dos potenciais de esferas rígidas e *ab initio* foram comparadas a outros resultados disponíveis na literatura, obtidos através de diferentes abordagens. A comparação mostrou que o potencial de esferas rígidas reproduz precisamente os perfis das propriedades termodinâmicas de ondas de choque para um número de Mach igual a 1,1, mas para números de Mach maiores este potencial não é adequado, levando a resultados não físicos quando este se aproxima de 10. Os resultados obtidos mostram que, além das soluções numéricas da equação de Boltzmann, o método que garante os melhores resultados em relação aos resultados experimentais para a estrutura de ondas de choque, é a simulação direta de Monte Carlo.

## 2 Conceitos básicos

Fluidos compressíveis são aqueles que apresentam variação na sua densidade ao longo do campo de escoamento. Pequenas oscilações (ou oscilações de pequena amplitude) nesses fluidos, são chamadas de ondas sonoras. Em cada ponto do fluido, uma onda sonora provoca alternadamente compressões e rarefações que se propagam com a velocidade do som em relação ao próprio fluido.

No estudo dos fluidos compressíveis, um parâmetro importante é a taxa de variação da densidade do gás  $\rho$  em relação à pressão  $p$ . Esta taxa está relacionada à velocidade do som  $a$  através da equação [17]

$$a = \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_s}. \quad (2.1)$$

Nesta expressão o índice  $s$  indica que a propagação de uma onda sonora é um processo adiabático e reversível, ou seja, isentrópico (a entropia permanece constante).

Para um gás ideal a relação entre a pressão e a densidade em um processo isentrópico é dada por

$$\frac{p}{\rho^\gamma} = \text{constante}, \quad (2.2)$$

onde  $\gamma$  é a razão entre os calores específicos à pressão e volume constantes,  $c_p$  e  $c_v$ , que está relacionada ao número de graus de liberdade molecular  $f$  da seguinte forma

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} = \frac{f+2}{f}. \quad (2.3)$$

Para gases monoatômicos, como o argônio e o hélio,  $f = 3$  e  $\gamma = 5/3$ . Para gases diatômicos, como oxigênio e nitrogênio,  $f = 5$  e  $\gamma = 7/5$  [18].

A velocidade do som em gases ideais é obtida combinando as equações (2.1) e (2.2) com a equação de estado dos gases ideais

$$p = nk_B T, \quad (2.4)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura e  $n$  é a densidade numérica, ou seja, o número de partículas por unidade de volume, que representa a razão entre a densidade  $\rho$  e a massa  $m$  de uma partícula,  $n = \rho/m$ . Portanto, a velocidade do som em gases ideais pode ser escrita na forma

$$a = \sqrt{\frac{\gamma k_B T}{m}}. \quad (2.5)$$

Quando uma massa de gás em movimento possui velocidade comparável ou maior do que a velocidade do som, efeitos devido à compressibilidade do meio se tornam importantes.

Um dos efeitos mais marcantes dos escoamentos de alta velocidade são as ondas de choque. Um fluxo supersônico comprime o gás à sua frente, mudando localmente o valor de suas propriedades físicas.

Um parâmetro extremamente importante no estudo das ondas de choque é o número de Mach. Ele é definido como a razão entre a velocidade do fluxo  $u$  e a velocidade do som,

$$M = \frac{u}{a}. \quad (2.6)$$

Conforme sugere [19], um fluxo pode ser classificado de acordo com o seu número de Mach segundo a nomenclatura da Tabela 1. Ao longo desta dissertação, no entanto, será utilizado o termo supersônico para referir-se a todo o escoamento que tiver velocidade acima da velocidade do som ( $M > 1$ ).

Tabela 1 – Classificação do escoamento de acordo com o número de Mach.

$0 < M \ll 1$	subsônico
$M \sim 1$	transônico
$1 < M < 5$	supersônico
$M \geq 5$	hipersônico

A onda de choque é a superfície de transição entre um fluxo supersônico e um fluxo subsônico. Essa transição ocorre ao longo de uma distância muito pequena, da ordem de alguns livres caminhos médios, ou seja, depois de apenas algumas colisões intermoleculares. A passagem quase instantânea entre dois estados distintos do gás provoca mudanças súbitas e extremas em todas as propriedades termodinâmicas do meio. Esses efeitos se tornam ainda mais extremos conforme a velocidade do fluxo aumenta.

## 2.1 Ondas de choque normais

No estudo de sistemas fora do equilíbrio, as ondas de choque normais são um dos fenômenos mais simples e interessantes que podem ser investigados. A Figura 1 representa uma onda de choque normal, em um escoamento estacionário unidimensional, em um sistema de referência vinculado à onda, ou seja, no qual a onda de choque está em repouso. Neste referencial, o gás escoia paralelamente ao eixo  $x$ , sendo que na região 1 um fluxo uniforme desloca-se com velocidade supersônica  $u_1$  na direção positiva do eixo  $x$ , e na região 2 um fluxo uniforme desloca-se com velocidade subsônica  $u_2$  na mesma direção. A onda de choque é a camada de transição que separa os dois estados do gás. No esquema da figura 1, um escoamento supersônico, ao atingir um gás inicialmente em equilíbrio (região 2), comprime-o fazendo com que adquira uma velocidade subsônica.

As linhas tracejadas nos pontos 1 e 2 representam as fronteiras abertas que delimitam o campo de escoamento, ou seja, não há interação do gás com fronteiras sólidas. Como a onda de choque tem uma espessura muito pequena em relação ao escoamento, ela é usualmente representada por duas linhas paralelas.

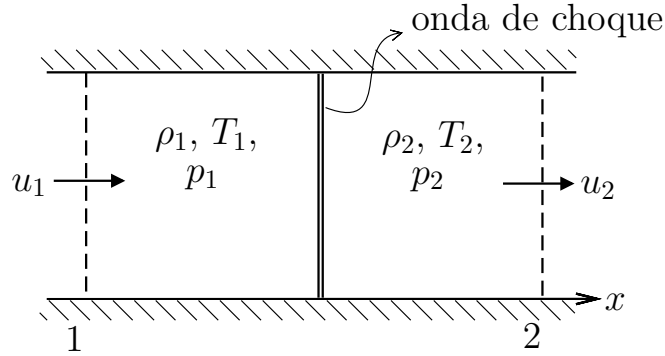


Figura 1 – Onda de choque normal no referencial da onda.

No caso de um escoamento unidimensional, todas as propriedades físicas do escoamento dependem apenas da coordenada  $x$ . A direção das ondas de choque é caracterizada pelo vetor normal à superfície do choque. Quando este vetor é paralelo à direção do escoamento, então as ondas de choque são ditas normais ou planas.

Assume-se que nas regiões 1 e 2 o gás está em equilíbrio, e que o fluxo é adiabático, ou seja, não há calor sendo acrescentado ou retirado da região do escoamento. A velocidade, densidade, temperatura e pressão na região 1, que corresponde ao escoamento supersônico, são  $u_1$ ,  $\rho_1$ ,  $T_1$  e  $p_1$ , respectivamente. As variáveis correspondentes na região 2 são representadas por  $u_2$ ,  $\rho_2$ ,  $T_2$  e  $p_2$ , e caracterizam o escoamento subsônico.

Ondas de choque podem ser obtidas em laboratório, através de diversos tipos de tubos de choque, que vêm sendo aprimorados desde sua concepção, ainda no século XIX. Um dos tubos de choque mais simples é constituído por um cilindro de seção transversal constante, dividido por um diafragma em duas câmaras, uma à alta pressão e outra à baixa pressão, como mostra a Figura 2. Quando ocorre a ruptura do diafragma, é gerada uma onda de choque que se propaga imediatamente na câmara de baixa pressão, comprimindo o gás desta região.

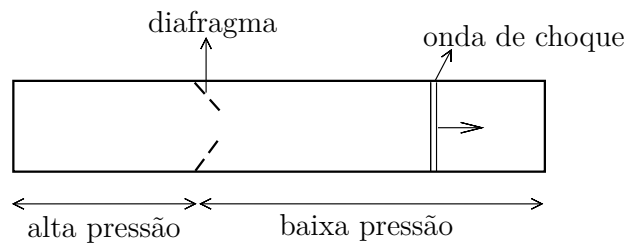


Figura 2 – Tubo de choque.

## 2.2 Leis de conservação

Na região delimitada entre os pontos 1 e 2 da Figura 1, através da qual o gás escoar, princípios físicos fundamentais devem ser aplicados para descrever apropriadamente o problema. São eles a conservação da massa, do momentum e da energia.

O fluxo de massa deve ser contínuo através da região do escoamento. A conservação da massa é dada pela equação da continuidade [20],

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla_r \cdot \rho \mathbf{u} = 0. \quad (2.7)$$

Nesta equação  $\nabla_r$  é o operador nabla, cujas componentes são  $\nabla_r = \mathbf{i}\partial/\partial x + \mathbf{j}\partial/\partial y + \mathbf{k}\partial/\partial z$ ,  $\mathbf{u}$  é o vetor velocidade do fluxo e  $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$  são os vetores unitários. O produto escalar do operador nabla com  $\rho \mathbf{u}$  é o operador  $\nabla_r \cdot \rho \mathbf{u} = \partial \rho u_x / \partial x + \partial \rho u_y / \partial y + \partial \rho u_z / \partial z$ .

A lei de conservação do momentum, na ausência de forças sobre o fluido, é dada pela expressão [20],

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla_r \cdot (\mathbf{P} + \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = 0, \quad (2.8)$$

onde  $\mathbf{P}$  é o tensor pressão, que está relacionado ao tensor viscosidade  $\boldsymbol{\sigma}$  através da equação [21],

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{l}p - \mathbf{P}, \quad (2.9)$$

e  $\mathbf{l} = \mathbf{ii} + \mathbf{jj} + \mathbf{kk}$  é o tensor identidade. Para um gás em equilíbrio, cujos gradientes macroscópicos de velocidade e temperatura são nulos  $\mathbf{P} = \mathbf{l}p$ . Em muitos casos a aproximação  $\boldsymbol{\sigma} \approx 0$  é suficiente, especialmente quando não existem fronteiras sólidas e para o gás distante da região de influência de uma onda de choque.

A lei de conservação da energia é dada por [20]

$$\frac{\partial \rho(u^2/2 + e)}{\partial t} + \nabla_r \cdot [\mathbf{q} + \rho \mathbf{u}(u^2/2 + e) + \mathbf{u} \cdot \mathbf{P}] = 0, \quad (2.10)$$

onde  $\mathbf{q}$  é o vetor fluxo de calor e  $e$  é a energia interna específica do gás, ou seja, a energia interna por unidade de massa, que para um gás monoatômico é definida como

$$e = \frac{3k_B T}{2m}. \quad (2.11)$$

No caso específico considerado, o fluxo é estacionário, de modo que todas as derivadas em relação ao tempo são nulas, e unidimensional, logo,

$$\mathbf{u} = u\mathbf{i}, \quad \mathbf{r} = x\mathbf{i}, \quad \nabla_r = \mathbf{i} \frac{d}{dx}, \quad \mathbf{q} = q\mathbf{i}, \quad \mathbf{P} = P\mathbf{ii}. \quad (2.12)$$

As equações da continuidade, do momentum e da energia ficam escritas, respectivamente, da seguinte forma,

$$\frac{d(\rho u)}{dx} = 0, \quad (2.13)$$

$$\frac{d(P + \rho u^2)}{dx} = 0, \quad (2.14)$$

$$\frac{d}{dx} \left[ q + \rho u \left( \frac{u^2}{2} + e \right) + uP \right] = 0. \quad (2.15)$$

## 2.3 Relações de Rankine-Hugoniot

Integrando as equações (2.13), (2.14) e (2.15) entre os pontos 1 e 2 da Figura 1, onde o gás está em equilíbrio termodinâmico, obtém-se o seguinte conjunto de equações,

$$\rho_1 u_1 = \rho_2 u_2, \quad (2.16)$$

$$p_1 + \rho_1 u_1^2 = p_2 + \rho_2 u_2^2, \quad (2.17)$$

$$\rho_1 u_1 \left( \frac{u_1^2}{2} + e_1 + \frac{p_1}{\rho_1} \right) = \rho_2 u_2 \left( \frac{u_2^2}{2} + e_2 + \frac{p_2}{\rho_2} \right). \quad (2.18)$$

Essas equações são válidas desde que as seções 1 e 2 estejam fora da região de dissipação da onda de choque, onde o fluido é considerado não viscoso, de modo que  $P = p$  e  $q = 0$ .

A última equação, (2.18), pode ser escrita em termos da entalpia específica, definida por  $h \equiv e + p/\rho$ , e, com o auxílio de (2.16), colocada na seguinte forma,

$$\frac{u_1^2}{2} + h_1 = \frac{u_2^2}{2} + h_2. \quad (2.19)$$

É possível reescrever as equações de conservação (2.16) - (2.18) em termos de um único parâmetro, o número de Mach do fluxo supersônico,  $M_1$ .

Combinando as definições de número de Mach, (2.6), e da velocidade do som, (2.5), com a equação de estado na forma  $k_B T/m = p/\rho$ , tem-se que

$$M = \frac{u}{a} = \frac{u}{\sqrt{\gamma k_B T/m}} = \frac{u}{\sqrt{\gamma p/\rho}},$$

e o número de Mach pode ser escrito como

$$M^2 = \frac{u^2 \rho}{\gamma p}. \quad (2.20)$$

Com a ajuda desta expressão, é possível reescrever a equação (2.17) na forma

$$p_1(1 + \gamma M_1^2) = p_2(1 + \gamma M_2^2). \quad (2.21)$$

Substituindo a expressão para a entalpia em um gás ideal, dada por  $h = c_p T$ , em (2.19), obtém-se

$$\frac{u_1^2}{2} + c_p T_1 = \frac{u_2^2}{2} + c_p T_2. \quad (2.22)$$



Os calores específicos  $c_p$  e  $c_v$  estão relacionados através da expressão

$$c_p - c_v = \frac{k_B}{m}. \quad (2.23)$$

Utilizando  $\gamma \equiv c_p/c_v$  em (2.23), é possível expressar  $c_p$  da seguinte forma

$$c_p = \frac{\gamma k_B}{m(\gamma - 1)}. \quad (2.24)$$

Portanto, substituindo (2.24) e (2.20) na equação (2.22), obtém-se

$$\frac{M_1^2 \gamma p_1}{2\rho_1} + \frac{\gamma k_B T_1}{m(\gamma - 1)} = \frac{M_2^2 \gamma p_2}{2\rho_2} + \frac{\gamma k_B T_2}{m(\gamma - 1)}, \quad (2.25)$$

e utilizando a equação de estado  $p/\rho = k_B T/m$ , encontra-se a relação entre as temperaturas em termos dos números de Mach,

$$T_1[2 + (\gamma - 1)M_1^2] = T_2[2 + (\gamma - 1)M_2^2]. \quad (2.26)$$

A partir da equação de estado dos gases ideais (2.4), obtém-se a relação entre as densidades

$$\rho_1 = \frac{p_1 T_2}{p_2 T_1} \rho_2 = \left( \frac{1 + \gamma M_2^2}{1 + \gamma M_1^2} \right) \left( \frac{2 + (\gamma - 1)M_1^2}{2 + (\gamma - 1)M_2^2} \right) \rho_2, \quad (2.27)$$

onde foram utilizadas as equações (2.26) e (2.21).

Decorre da definição (2.20) que  $M^2 \propto u^2 \rho/p$ . Com a ajuda desta relação e da equação (2.16) obtém-se

$$\left( \frac{M_2}{M_1} \right)^2 = \frac{p_1 \rho_1}{p_2 \rho_2}. \quad (2.28)$$

Substituindo as razões entre as pressões (2.21) e as densidades (2.27) em (2.28), encontra-se

$$\frac{M_2}{M_1} = \frac{1 + \gamma M_2^2}{1 + \gamma M_1^2} \sqrt{\frac{2 + (\gamma - 1)M_1^2}{2 + (\gamma - 1)M_2^2}}. \quad (2.29)$$

Esta equação possui duas soluções. A primeira é a solução trivial,  $M_1 = M_2$ , que não descreve nenhuma mudança nas propriedades do gás. A segunda solução é aquela que relaciona os números de Mach em uma onda de choque normal,

$$M_2 = \sqrt{\frac{2 + (\gamma - 1)M_1^2}{2\gamma M_1^2 - (\gamma - 1)}}. \quad (2.30)$$

Para um fluxo supersônico, com  $M_1 > 1$ , o número de Mach do gás comprimido pela onda de choque normal é sempre subsônico, ou seja,  $M_2 < 1$ . No limite em que  $M_1 \rightarrow \infty$ ,  $M_2$  se aproxima de um limite finito,  $M_2 \rightarrow \sqrt{(\gamma - 1)/2\gamma}$ , que para um gás monoatômico é aproximadamente igual a 0,4472.

Com a equação (2.30) é possível expressar a mudança das quantidades físicas macroscópicas através de uma onda de choque normal em função do número de Mach  $M_1$ . Substituindo (2.30) em (2.21), (2.26) e (2.27), encontra-se, respectivamente,

$$\frac{p_2}{p_1} = \frac{2\gamma M_1^2 - (\gamma - 1)}{\gamma + 1}, \quad (2.31)$$

$$\frac{T_2}{T_1} = \frac{(2 + (\gamma - 1)M_1^2)(2\gamma M_1^2 - (\gamma - 1))}{M_1^2(\gamma + 1)^2}, \quad (2.32)$$

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{u_1}{u_2} = \frac{(\gamma + 1)M_1^2}{(\gamma - 1)M_1^2 + 2}, \quad (2.33)$$

As equações (2.31), (2.32) e (2.33) são chamadas relações de Rankine-Hugoniot para ondas de choque normais em gases ideais. Elas foram obtidas de forma independente, primeiramente por Rankine [22], e depois por Hugoniot [23], e são válidas para qualquer número de Mach  $M_1$ .

O logaritmo das razões entre as propriedades do gás (2.31) - (2.33) em função do número de Mach  $M_1$ , é mostrado na Figura 3, para gases monoatômicos, cujo  $\gamma$  é igual a 5/3. Na figura, nota-se que conforme o número de Mach  $M_1$  aumenta, a pressão e a temperatura sempre crescem podendo assumir valores arbitrariamente grandes. A razão entre as densidades, no entanto, tende a um limite finito, que pode ser obtido fazendo  $M_1$  tender ao infinito na equação (2.33), que se reduz a

$$\frac{\rho_2}{\rho_1} = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1}. \quad (2.34)$$

Para  $\gamma = 5/3$  esse limite é igual a  $\rho_2/\rho_1 = 4$ , e para gases diatômicos, quando  $\gamma = 7/5$ , é igual a  $\rho_2/\rho_1 = 6$ .

É importante enfatizar que para as temperaturas que serão consideradas neste trabalho os gases não estão ionizados. Para um número de Mach igual a 10, que é o valor máximo utilizado, a razão entre as temperaturas dos dois estados do gás  $T_2/T_1$  (equação (2.32)) é aproximadamente igual a 32. Para uma temperatura inicial igual a  $T_1 = 300$  K, tem-se que  $T_2 = 9600$  K. A velocidade relativa média em uma colisão entre duas partículas iguais é obtida através da expressão  $\bar{g}_r = \sqrt{16k_B T_2/(\pi m)}$  [24]. A energia cinética relativa da colisão para a temperatura  $T_2$ , é, portanto,  $4k_B T_2/\pi$ , a partir da qual obtém-se a energia de, aproximadamente, 1,1 eV. Para o argônio, a energia de ionização é igual a 15,7596 eV e para o hélio 24,5874 eV [25]. Portanto, nenhum dos dois gases está ionizado a Mach 10.

## 2.4 Estrutura das ondas de choque

Conhecidas as condições termodinâmicas do gás em equilíbrio em torno da onda de choque, sua estrutura interna pode ser investigada. Para tanto, duas características

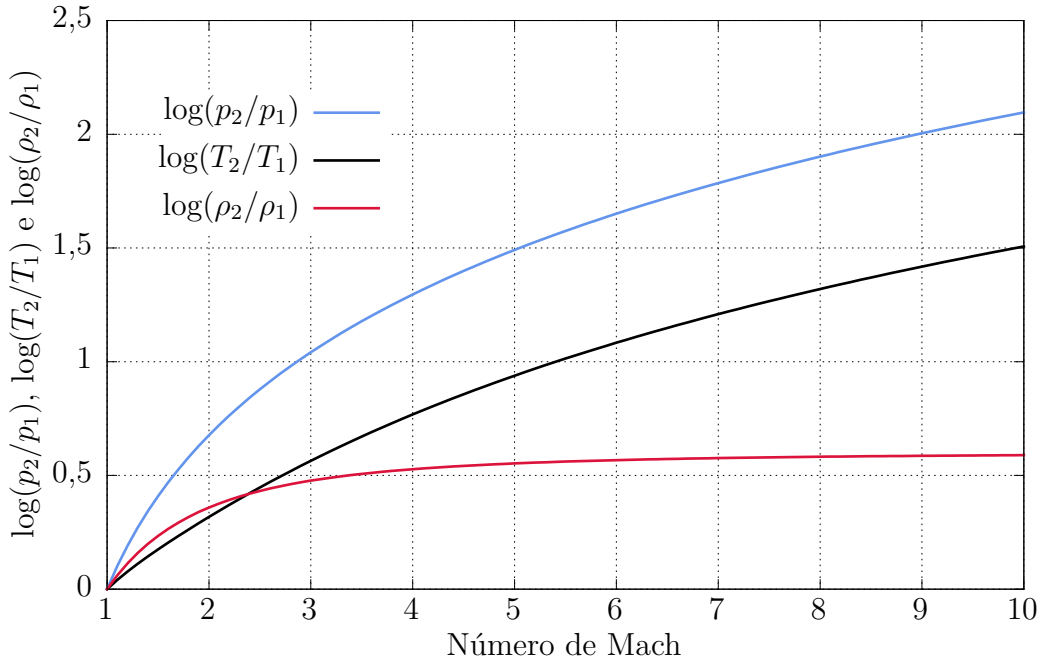


Figura 3 – Logaritmo das razões entre as propriedades do gás em função do número de Mach  $M_1$ , para  $\gamma = 5/3$ .

fundamentais precisam ser consideradas. A primeira é a ocorrência de efeitos dissipativos no interior dos choques, responsáveis pela formação de suas estruturas internas. A segunda é a característica microscópica das ondas de choque, que possuem ordem de grandeza do livre caminho médio molecular.

É possível verificar o que acontece com a entropia do gás comprimido pela onda de choque (região 2 da Figura 1). A menos de uma constante arbitrária, a entropia de um gás ideal é dada por  $s = c_v \ln(p/\rho^\gamma)$ . A diferença entre a entropia de cada lado da onda de choque é, portanto,

$$s_2 - s_1 = c_v \ln \left( \frac{p_2 \rho_1^\gamma}{p_1 \rho_2^\gamma} \right) = c_v \ln \left[ \frac{2\gamma M_1^2 - (\gamma - 1)}{\gamma + 1} \left( \frac{(\gamma - 1)M_1^2 + 2}{(\gamma + 1)M_1^2} \right)^\gamma \right], \quad (2.35)$$

onde as equações (2.31) e (2.33), para  $p_2/p_1$  e  $\rho_2/\rho_1$ , foram utilizadas.

Quando  $M_1 \sim 1$ , então,  $s_2 \sim s_1$ , ou seja, a mudança de estado é aproximadamente isentrópica. Quando  $M_1 \rightarrow \infty$ , a diferença (2.35) tende ao infinito, portanto, a entropia do gás comprimido aumenta com a intensidade do choque.

O aumento na entropia indica que um processo dissipativo irreversível ocorre através das ondas de choque. Portanto, sem considerar os efeitos dissipativos, a saber, condução de calor e viscosidade, não é possível descrever sua estrutura interna.

Além disso, o problema da estrutura das ondas de choques só pode ser resolvido quando a estrutura molecular do fluido é considerada. A transição de um fluxo supersônico para um fluxo subsônico através da onda de choque ocorre ao longo de uma pequena

distância, da ordem do livre caminho médio molecular  $\lambda$ , um parâmetro microscópico fundamental na determinação dos perfis das ondas.

O livre caminho médio é inversamente proporcional à densidade numérica  $n$  (quantidade de moléculas por unidade de volume) e à seção de choque total de colisão das partículas do gás  $\sigma_t$ . Conforme demonstrado por [26], para um gás em equilíbrio,  $\lambda$  é dado por

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma_t n}. \quad (2.36)$$

Para um potencial intermolecular de longo alcance, que seja diferente de zero para qualquer distância entre as partículas,  $\sigma_t$  será infinito e as partículas estarão constantemente colidindo entre si. Portanto, define-se um raio de colisão entre as moléculas, chamado de parâmetro de impacto limite (ou *cut-off*), representado por  $b_{m\acute{a}x}$ , que é utilizado para limitar a ação do potencial. Acima da distância limite estabelecida, o potencial é nulo e as partículas não interagem. A seção de choque  $\sigma_t$  é, então, definida em termos deste parâmetro como

$$\sigma_t = \pi b_{m\acute{a}x}^2. \quad (2.37)$$

Substituindo (2.37) em (2.36) obtém-se que  $\lambda$  é inversamente proporcional à  $b_{m\acute{a}x}^2$ . No entanto, as grandezas macroscópicas obtidas através da descrição microscópica não devem depender da escolha da distância  $b_{m\acute{a}x}$ . Portanto, o uso do livre caminho médio  $\lambda$  não é apropriado para problemas que utilizem potenciais arbitrários, com parâmetros de impacto limite. Nesses casos, um livre caminho equivalente, representado por  $\ell$ , definido através do coeficiente de viscosidade  $\mu$ , é dado pela expressão [20]

$$\ell = \frac{\mu v_{mp}}{p}, \quad (2.38)$$

onde  $p$  é a pressão e  $v_{mp}$  é a velocidade molecular mais provável dada por

$$v_{mp} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}. \quad (2.39)$$

A velocidade molecular mais provável é uma das velocidades características em teoria cinética. Ela é a velocidade que torna máxima a função de distribuição dos módulos das velocidades  $f_v(t, \mathbf{r}, v)$  (equação (2.60)) [27].

O salto contínuo de uma propriedade do gás através de uma onda choque estacionária em um gás simples, pode ser modelado como na Figura 4. Na figura,  $y$  representa uma propriedade do gás cujo valor cresce após o choque, como densidade ou temperatura, por exemplo. O salto no seu valor, de  $y_1$  para  $y_2$ , que são as condições de Rankine-Hugoniot para esta propriedade, ocorre ao longo da distância  $L$ , definida como a espessura da onda, que possui ordem de grandeza do livre caminho equivalente  $L \sim \ell$ .

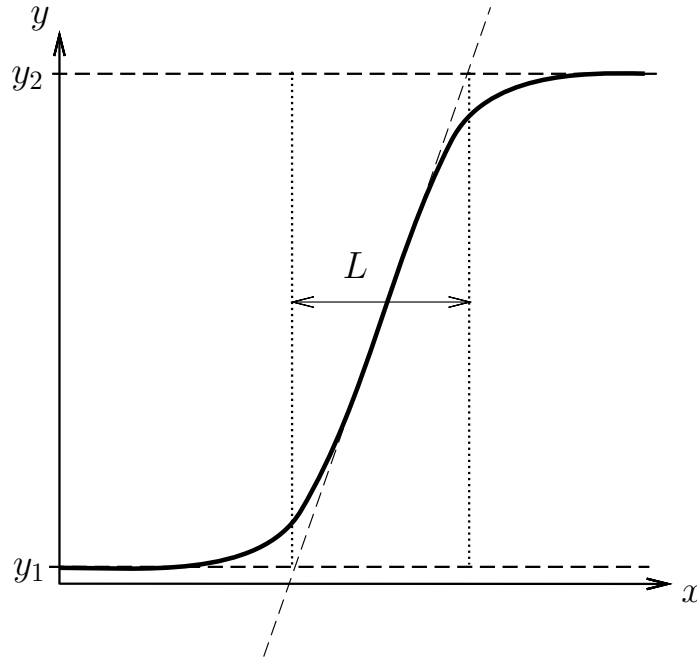


Figura 4 – Perfil típico de uma propriedade termodinâmica  $y$  em uma onda de choque.  $L$  é a espessura da onda.

A inclinação máxima da curva da Figura 4 é dada por

$$\left| \frac{dy}{dx} \right|_{máx} = \frac{y_2 - y_1}{L}. \quad (2.40)$$

Uma propriedade habitualmente utilizada como parâmetro de referência em trabalhos teóricos e experimentais é a inclinação máxima adimensional dos perfis das ondas de choque. Ela é definida como o valor absoluto da inclinação máxima  $|dy/dx|_{máx}$ , normalizado pela variação total no valor da propriedade através da onda  $y_2 - y_1$ , e pelo livre caminho equivalente do fluxo supersônico  $\ell_1$ ,

$$D_y = \frac{\ell_1}{y_2 - y_1} \left| \frac{dy}{dx} \right|_{máx}, \quad (2.41)$$

onde  $\ell_1 = \mu v_{mp}/p_1$  e  $v_{mp} = \sqrt{2k_B T_1/m}$ . Nesta equação,  $y$  pode ser  $u$ ,  $T$  ou  $\rho$ . Como é possível deduzir através das equações (2.40) e (2.41),  $D_y$  é igual ao inverso da espessura adimensional  $D_y = \ell_1/L$ .

Desde que a estrutura das ondas de choque passou a ser estudada, a inclinação máxima dos perfis das propriedades termodinâmicas se tornou um parâmetro fundamental no que diz respeito à confiabilidade do método utilizado. Resultados obtidos por métodos diferentes, tanto experimentais quanto teóricos, podem diferir de mais de 50% para o valor final da inclinação. Portanto, este é um problema que ainda hoje representa um desafio aos métodos tradicionais.

## 2.5 Dinâmica dos Gases

Na região em que o gás está em equilíbrio, as equações de conservação (2.16) - (2.18), que levam às relações de Rankine-Hugoniot, são apropriadas para descrever o escoamento. Contudo, na vizinhança do choque o gás se afasta do equilíbrio, e métodos em dinâmica dos gases devem ser utilizados para descrevê-lo.

A estrutura das ondas de choque em gases é tradicionalmente estudada através de duas abordagens, a microscópica e a macroscópica. O modelo macroscópico é utilizado em mecânica dos meios contínuos e tem como principal suposição a de que o gás se comporta como um meio contínuo, sendo o modelo matemático para descrevê-lo as equações de Navier-Stokes. O modelo microscópico é utilizado no âmbito da teoria cinética dos gases e considera o gás no nível molecular, descrevendo sua dinâmica por meio de métodos estatísticos. O modelo matemático utilizado é a equação de Boltzmann.

### 2.5.1 Mecânica dos meios contínuos

A mecânica dos meios contínuos conduz às clássicas equações de Navier-Stokes, que formam um conjunto de equações diferenciais parciais acopladas para as propriedades macroscópicas mensuráveis do gás, como temperatura  $T$ , velocidade  $u$  e densidade  $\rho$ .

No referencial da onda de choque, as equações de conservação (2.13) - (2.15) podem ser integradas entre um ponto distante do choque, onde as condições do gás são uniformes e iguais à  $T_1$ ,  $\rho_1$ ,  $u_1$  e  $p_1$ , e um ponto qualquer da região de dissipação. As seguintes expressões para conservação da massa, do momentum e da energia são obtidas [28],

$$\rho_1 u_1 = \rho u, \quad (2.42)$$

$$p_1 + \rho_1 u_1^2 = P + \rho u^2, \quad (2.43)$$

$$\rho_1 u_1 \left( \frac{u_1^2}{2} + e_1 \right) + p_1 u_1 = \rho u \left( \frac{u^2}{2} + e \right) + uP + q. \quad (2.44)$$

As variáveis sem índice referem-se a um ponto arbitrário dentro da onda de choque. Na região 1, onde o gás está em equilíbrio,  $P_1 = p_1$  e  $q_1 = 0$ . Na onda de choque, de acordo com (2.9),  $P = p - \sigma_{xx}$ , onde  $\sigma_{xx}$  é a componente do tensor viscosidade, assim como  $q$  é a componente do vetor fluxo de calor, na direção do escoamento.

Na hipótese dos meios contínuos duas leis fundamentais completam o conjunto de equações, a lei de Fourier da condução de calor e a lei de Newton da viscosidade. A lei de Fourier relaciona o vetor fluxo de calor  $\mathbf{q}$  ao gradiente de temperatura através da equação [29, 20, 30]

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla_r T, \quad (2.45)$$

onde  $\kappa$  é o coeficiente de condutividade térmica. Para o caso unidimensional  $\nabla_r T = dT/dx$ , portanto,

$$q = -\kappa \frac{dT}{dx}. \quad (2.46)$$

Na lei de Newton o tensor pressão está relacionado ao tensor taxa de cisalhamento  $\mathbf{S}$  através da equação [29, 20, 30]

$$\mathbf{P} = \mathbf{I}p - 2\mu\mathbf{S}. \quad (2.47)$$

As componentes do tensor  $\mathbf{S}$  são dadas por

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \nabla_r \cdot \mathbf{u}, \quad (2.48)$$

onde  $r_1, r_2, r_3$  são as componentes  $x, y, z$  do vetor posição  $\mathbf{r}$ , e  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker, definido como

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j, \\ 0, & \text{se } i \neq j. \end{cases}$$

Para o caso unidimensional  $\nabla_r \cdot \mathbf{u} = du/dx$ , e a equação (2.48) possui apenas uma componente não nula, dada por

$$S_{xx} = \frac{2}{3} \frac{du}{dx}. \quad (2.49)$$

Portanto, a lei de Newton (2.47) para a onda de choque unidimensional tem a forma

$$P = p - \frac{4}{3} \mu \frac{du}{dx}. \quad (2.50)$$

Substituindo (2.46) e (2.50) nas equações de conservação (2.42) - (2.44) obtemos

$$\rho_1 u_1 = \rho u, \quad (2.51)$$

$$p_1 + \rho_1 u_1^2 = p + \rho u^2 - \frac{4}{3} \mu \frac{du}{dx}, \quad (2.52)$$

$$\rho_1 u_1 \left( \frac{u_1^2}{2} + e_1 \right) + p_1 u_1 = \rho u \left( \frac{u^2}{2} + e \right) + pu - \frac{4}{3} \mu u \frac{du}{dx} - \kappa \frac{dT}{dx}. \quad (2.53)$$

Em termos da entalpia, é possível reescrever a última equação na forma

$$\rho_1 u_1 \left( \frac{u_1^2}{2} + h_1 \right) = \rho u \left( \frac{u^2}{2} + h \right) - \frac{4}{3} \mu u \frac{du}{dx} - \kappa \frac{dT}{dx}. \quad (2.54)$$

Considerando que para um gás ideal a entalpia é dada por  $h = c_p T$  e sendo  $j$  a densidade de fluxo de massa, que é constante ao longo do campo de escoamento, é possível reescrever as equações de conservação (2.51), (2.52) e (2.54) na forma,

$$\rho_1 u_1 = \rho u \equiv j, \quad (2.55)$$

$$(p - p_1) + j(u - u_1) - \frac{4}{3}\mu \frac{du}{dx} = 0, \quad (2.56)$$

$$\frac{1}{2}j(u^2 - u_1^2) + jc_p(T - T_1) - \frac{4}{3}\mu u \frac{du}{dx} - \kappa \frac{dT}{dx} = 0, \quad (2.57)$$

onde os coeficientes de viscosidade e de condutividade térmica são funções da temperatura,  $\mu = \mu(T)$  e  $\kappa = \kappa(T)$ , que podem ser determinados experimentalmente, como no trabalho de Kestin et al. [31], ou *ab initio*, como nos trabalhos de Bich et al. [14], Vogel et al. [16] e Benites [32].

Portanto, o sistema formado pelas equações de conservação (2.56), (2.57) e pela equação de estado,  $p = \rho k_B T / m$ , que pode ser escrita em termos de  $j$  como

$$up = \frac{jk_B T}{m}, \quad (2.58)$$

constitui um conjunto completo de três equações para as três variáveis do problema unidimensional  $u$ ,  $p$ ,  $T$ . Esse sistema é chamado de equações de Navier-Stokes para o escoamento plano unidimensional.

Não existe uma solução analítica geral conhecida para este sistema de equações. Porém, as equações podem ser simplificadas, fazendo-se aproximações adequadas a respeito do escoamento, e então resolvidas numericamente.

A hipótese dos meios contínuos implica que a dimensão que caracteriza a região de escoamento  $x$  deve ser significativamente maior do que o livre caminho equivalente entre as moléculas  $\ell$ . Uma condição de validade das equações de Navier-Stokes é, portanto, que  $x \gg \ell$ . Quando os gradientes das propriedades macroscópicas do gás variam de forma significativa ao longo de um livre caminho médio  $x \sim \ell$ , como em uma onda de choque intensa, a suposição de meios contínuos não é mais válida. Nesta situação, deve-se utilizar um modelo microscópico para descrever esta região do escoamento.

Outra limitação da aplicação das equações de Navier-Stokes refere-se ao intervalo de tempo  $\Delta t$  no qual ocorrem variações significativas nas propriedades macroscópicas do gás. Se este intervalo de tempo for significativamente maior do que livre tempo médio entre colisões intermoleculares sucessivas  $\tau$ , ou seja,  $\Delta t \gg \tau$ , a hipótese dos meios contínuos é válida. No entanto, qualquer variação repentina em alguma variável do gás, que ocorra dentro de poucos livres tempos médios  $\Delta t \sim \tau$ , não permite que o escoamento seja corretamente descrito pela mecânica dos meios contínuos.

## 2.5.2 Teoria Cinética dos Gases

A teoria cinética considera que o gás é formado por muitas partículas, que, na maior parte do tempo, deslocam-se livremente, sendo rapidamente interrompidas ao chocarem-se com as paredes do recipiente que contém o gás ou com outras partículas. Além disso,



quando ocorrem colisões entre as partículas do gás, elas serão na maior parte das vezes colisões binárias, ou seja, envolvendo apenas duas partículas. Um gás que corresponda a essas características é chamado de gás diluído. Estes gases obedecem à equação de estado (2.4), válida para gases à pressões iguais ou menores do que a pressão atmosférica.

Na teoria cinética, o estado de cada partícula de um gás monoatômico pode ser caracterizado por sua posição no espaço  $\mathbf{r}$  e sua velocidade  $\mathbf{v}$ . O estado do gás é caracterizado por uma função de distribuição  $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ , que contém informações sobre a distribuição das moléculas no sistema e a distribuição das velocidades moleculares, e é definida de forma que  $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})d\mathbf{r}d\mathbf{v}$  é o número provável de partículas que, no tempo  $t$ , encontram-se no elemento de volume entre  $\mathbf{r}$  e  $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$  e que possuem velocidades entre  $\mathbf{v}$  e  $\mathbf{v} + d\mathbf{v}$ . Conhecida a função de distribuição, as variáveis termodinâmicas do gás podem ser encontradas.

Para um gás em equilíbrio, a função de distribuição de velocidades é escrita como [24, 20]

$$f^M(\mathbf{v}) = n \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{mv^2}{2k_B T} \right), \quad (2.59)$$

onde  $n$  é a densidade numérica. A função  $f^M(\mathbf{v})$  é conhecida como distribuição Maxwelliana.

A função de distribuição dos módulos das velocidades  $f_v(t, \mathbf{r}, v)$  é definida de modo que  $f_v(t, \mathbf{r}, v)dv$  é igual ao número de partículas por unidade de volume cujos módulos das velocidades estão entre  $v$  e  $v + dv$  [27],

$$f_v(t, \mathbf{r}, v)dv = 4\pi n \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 \exp \left( -\frac{mv^2}{2k_B T} \right) dv. \quad (2.60)$$

A partir de (2.60) as velocidades características, como o módulo da velocidade mais provável  $v_{mp}$ , equação (2.39), são obtidas.

Quando um gás está fora do equilíbrio, a evolução da sua função de distribuição  $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$  no espaço de fase é descrita pela equação de Boltzmann. A equação de Boltzmann baseia-se em várias suposições. Algumas delas são: ocorrem apenas colisões binárias em um gás diluído; em qualquer posição e tempo as velocidades de duas partículas não estão correlacionadas, esta última conhecida como hipótese do caos molecular; o efeito de forças externas sobre as partículas durante a colisão é desprezível [27].

A equação de Boltzmann, na ausência de forças externas, é dada por [20]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f = Q(f, \mathbf{v}), \quad (2.61)$$

onde  $f \equiv f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ . O termo  $Q(f, \mathbf{v})$  é chamado de integral de colisões, e expressa a taxa de variação temporal da função de distribuição devido às colisões moleculares. A integral de colisões  $Q(f, \mathbf{v})$  contém o potencial de interação intermolecular e está relacionada à natureza das colisões binárias.

No equilíbrio, a única função  $f$  que satisfaz a equação de Boltzmann é a distribuição Maxwelliana  $f^M(\mathbf{v})$ . No entanto, em geral, a equação de Boltzmann não é passível de solução exata e deve, portanto, ser resolvida através de métodos de aproximação.

Chapman e Enskog [30] obtiveram independentemente métodos aproximativos equivalentes de solução da equação de Boltzmann. O método de Chapman-Enskog consiste na expansão da função de distribuição do gás em termos de um parâmetro pequeno. A aproximação de ordem zero leva às equações dos fluidos não viscosos (equações de Euler), na aproximação de primeira ordem são obtidas as equações de Navier-Stokes e os termos de segunda ordem levam às equações de Burnett. A terceira aproximação é conhecida como Super-Burnett. Quanto mais termos são considerados na aproximação, maior é a precisão dos resultados.

Outro método analítico de solução da equação de Boltzmann utiliza aproximações da equação cinética original, conhecidas como equações modelo. Elas simplificam a equação de Boltzmann aproximando o termo colisional  $Q(f, \mathbf{v})$ . São exemplos a equação BGK [33] e o modelo S [34].

## 2.6 Potencial Intermolecular

A força de interação entre duas partículas é função da distância internuclear  $r$ , e é dada por

$$F(r) = -\frac{dU}{dr}, \quad (2.62)$$

onde  $U$  é o potencial de interação intermolecular. Tipicamente, a força entre as moléculas é fortemente repulsiva para pequenas distâncias, tendendo a afastar as partículas, e, conforme a distância aumenta, a força diminui rapidamente, tornando-se fracamente atrativa. A forma exata do potencial é, em geral, difícil de ser determinada, e portanto alguns modelos foram propostos. Na Figura 5 são mostrados os principais potenciais utilizados em teoria cinética, que serão apresentados neste capítulo.

### 2.6.1 Potencial de Esferas rígidas (HS)

O modelo mais simples de uma partícula microscópica é o de uma pequena esfera rígida (HS, do inglês, hard sphere) de diâmetro fixo  $d$ . Este modelo representa somente a repulsão entre as partículas, que só interagem quando a distância entre elas é menor do que um diâmetro molecular. O potencial de esferas rígidas é dado por

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & \text{quando } r < d, \\ 0, & \text{quando } r > d. \end{cases} \quad (2.63)$$

O diâmetro molecular pode ser obtido a partir dos coeficientes de viscosidade e condutividade térmica, no entanto, um valor diferente de  $d$  é obtido para cada temperatura.

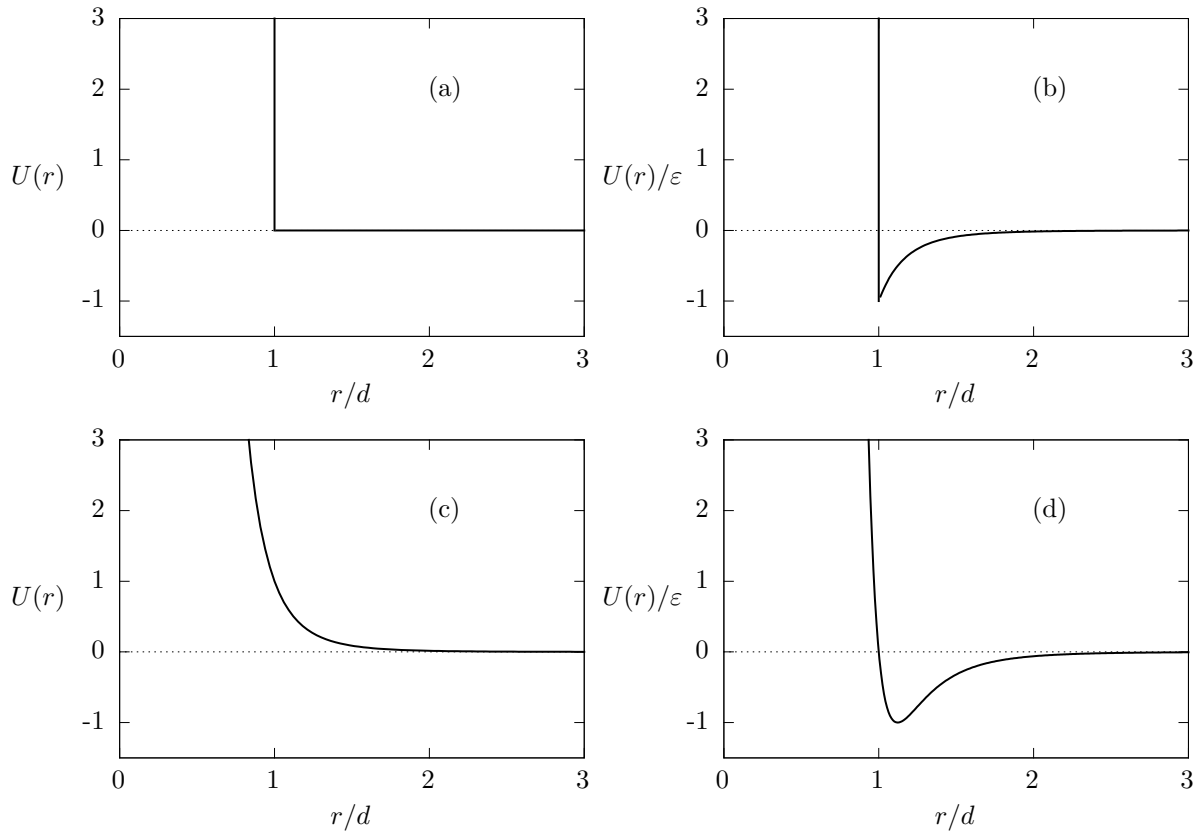


Figura 5 – Modelos de potenciais de interação intermolecular: (a) Potencial de esferas rígidas; (b) Potencial de Sutherland ( $\nu = 6$ ); (c) Potencial de centros de repulsão ( $\nu = 7$ ,  $k = 1$ ); (d) Potencial de Lennard-Jones.

Os modelos moleculares escolhidos para serem utilizados nos estudos de escoamento de gases devem, preferencialmente, reproduzir o coeficiente de viscosidade  $\mu$  dos gases reais e sua dependência com a temperatura. A viscosidade (atrito interno) causa uma transferência irreversível de momentum a partir de pontos do fluido onde a velocidade é maior para aqueles onde a velocidade é menor. Quanto maior for a temperatura do gás, as moléculas possuirão mais energia e maior será o momentum das moléculas que colidem. Portanto, a viscosidade aumenta com o aumento da temperatura do gás [35].

A relação entre viscosidade e temperatura para o modelo de esferas rígidas, como demonstra [21], é dada por

$$\mu = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi m k_B T}}{\sigma_t}, \quad (2.64)$$

onde  $\sigma_t$  é a seção de choque total, que para esferas rígidas é constante e igual a

$$\sigma_t = \pi d^2. \quad (2.65)$$

Tipton et al. [36] obtiveram a expressão para a viscosidade em termos da temperatura para este modelo, através do método de Chapman-Enskog até a 60ª ordem de aproximação em expansão por polinômios de Sonine. Nesta aproximação, um termo igual a 1,016034 é

multiplicado à equação (2.64), ou seja, as correções de ordem superior são relativamente pequenas.

No entanto, a dependência da viscosidade com a temperatura  $\mu \propto \sqrt{T}$ , obtida através deste potencial, não está de acordo com os resultados empíricos como, por exemplo, Kestin et al. [31]. A viscosidade dos gases cresce com a temperatura a uma taxa maior do que a fornecida por este modelo. Esta divergência se deve à influência da parte atrativa do potencial, que é desconsiderada pelo modelo de esferas rígidas, e à parte repulsiva que para pequenas distâncias é intensa porém finita.

Sutherland propôs adicionar um termo atrativo ao potencial de esferas rígidas, da forma  $U = -\varepsilon(d/r)^\nu$ , para  $r > d$ , onde  $\varepsilon$  é a profundidade do poço potencial e  $\nu$  uma constante. A lei da viscosidade obtida a partir do potencial de Sutherland é dada por [21]

$$\mu = \left( \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\pi m k_B T}}{\sigma_t} \right) \left/ \left( 1 + \frac{S_u}{T} \right) \right., \quad (2.66)$$

onde  $S_u$  é a constante de Sutherland, que é diferente para cada gás.

## 2.6.2 Potencial de centros de repulsão

Para forças intermoleculares do tipo  $kr^{-\nu}$ , a função potencial de centros de repulsão tem a forma

$$U(r) = \frac{k}{(\nu - 1)} \frac{1}{r^{\nu-1}}, \quad k > 0, \quad \nu > 1, \quad (2.67)$$

onde  $k$  e  $\nu$  são constantes. O potencial (2.67) também representa somente a repulsão entre as partículas. Quando  $\nu = 5$  este potencial é conhecido como o modelo de Maxwell.

Para este potencial a viscosidade depende apenas da temperatura, e a relação entre elas é igual a  $\mu \propto T^\omega$ , onde  $\omega = 1/2 + 2/(\nu - 1)$ , chamado expoente da lei viscosidade-temperatura. O valor de  $\omega$  depende do valor experimental de  $\mu$  e é diferente para cada temperatura. Para o argônio, nas condições normais de temperatura e pressão,  $\omega \approx 0,81$ , e para hélio, nas mesmas condições,  $\omega \approx 0,66$  [21]. Os potenciais de centros de repulsão capturam de forma mais adequada a variação da viscosidade do gás com a temperatura do que o modelo HS.

O modelo das esferas rígidas variáveis (VHS, do inglês, variable hard sphere), baseado no potencial de centro de repulsão, foi proposto por Bird [26] para corrigir a dependência entre viscosidade e temperatura do modelo de esferas rígidas. Como a seção de choque deve variar com a velocidade relativa da colisão, Bird supôs que o diâmetro molecular varia com a velocidade relativa  $g_r$ , de acordo com a expressão

$$d = d_{ref} \left( \frac{g_{r,ref}}{g_r} \right)^{2/(\nu-1)}, \quad (2.68)$$

onde o índice *ref* significa valores de referência para o gás, para uma determinada temperatura. A relação entre a viscosidade e a temperatura para este modelo é a mesma obtida anteriormente,  $\mu \propto T^\omega$ , com os mesmos valores para  $\omega$ .

No modelo VHS, o ângulo de deflexão é isotrópico, ou seja, todas as direções são igualmente prováveis para uma dada velocidade relativa, e é dado pela mesma expressão do modelo HS, (2.72). Para corrigir esta deficiência, Koura e Matsumoto [37] propuseram o modelo de esferas macias variáveis (VSS, do inglês, variable soft sphere), no qual o diâmetro da partícula varia da mesma forma que no modelo VHS, mas o ângulo de deflexão não é mais isotrópico. Esta modificação é especialmente relevante para mistura de gases.

### 2.6.3 Potencial de Lennard-Jones (LJ)

O modelo de Lennard-Jones (LJ) representa a parte atrativa e repulsiva do potencial e é dado por

$$U(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{d}{r} \right)^{12} - \left( \frac{d}{r} \right)^6 \right], \quad (2.69)$$

onde  $\varepsilon$  é a profundidade do poço potencial, ou seja, a curva da energia potencial tem um valor mínimo em  $U = -\varepsilon$ , e  $d$  é o diâmetro médio das partículas. O primeiro termo de (2.69) descreve a repulsão entre as duas partículas interagentes e o segundo termo descreve a atração entre elas.

Os parâmetros  $d$  e  $\varepsilon$  são obtidos a partir de medidas experimentais de diferentes coeficientes, como por exemplo os parâmetros extraídos a partir de medidas da viscosidade,  $\varepsilon/k_B = 124,0$  K e  $d = 0,3418$  nm para o argônio e  $\varepsilon/k_B = 10,22$  K e  $d = 0,2576$  nm para o hélio, fornecidos por Hirschfelder et al. [38].

### 2.6.4 Potencial *ab initio* (AI)

Os métodos *ab initio* da mecânica quântica têm por objetivo extrair resultados de um sistema molecular a partir da resolução da equação de Schrödinger, sem a utilização de parâmetros de ajuste a dados experimentais. Dos diversos métodos de aproximação já sugeridos na literatura, um dos que apresentam maior acurácia e que levam em consideração mais termos aproximativos foram calculados para o argônio por Jäger et al. [11] e Vogel et al. [16], e para o hélio por Hellmann et al. [12] e Bich et al. [14].

O procedimento para obter esses potenciais consiste em, primeiramente, calcular as energias potenciais de interação entre os átomos do gás  $U(r)$ , para valores discretos da separação interatômica  $r$ , a partir de um método *ab initio*. Os valores obtidos de  $U(r)$  são então ajustados a um potencial modelo.

Para ajustar as energias de interação *ab initio* do hélio, os autores de [12] e [14], utilizaram um potencial proposto por Tang e Toennies [39], com algumas modificações,

que possui a seguinte forma funcional

$$\frac{U(r)}{k_B} = A \exp(a_1 r + a_2 r^2 + a_{-1} r^{-1} + a_{-2} r^{-2} + d_1 \sin(d_2 r + d_3)) - \sum_{n=3}^8 \frac{C_{2n}}{r^{2n}} \left[ 1 - e^{-br} \sum_{k=0}^{2n} \frac{(br)^k}{k!} \right], \quad (2.70)$$

com os parâmetros de ajuste dados pela Tabela 2. O primeiro termo de (2.70) é um potencial repulsivo e o segundo um potencial atrativo.  $C_{2n}$  são coeficientes de dispersão e a expressão entre colchetes é a função de amortecimento proposta por Tang e Toennies para evitar um comportamento não físico do potencial quando a distância internuclear  $r$  tender a zero, onde  $b$  é uma constante.

Tabela 2 – Parâmetros do potencial *ab initio* para o hélio, equação (2.70), onde  $a_0 = 5,29177249 \times 10^{-11}$  m é o raio de Bohr. Fonte: [12].

Parâmetro	Valor
$A$ (K)	$0,307092338615 \times 10^7$
$a_1(a_0^{-1})$	$-2,01651289932$
$a_2(a_0^{-2})$	$-0,0459521265125$
$a_{-1}(a_0)$	$-0,431646276045$
$a_{-2}(a_0^2)$	$0,138539045980$
$d_1$	$0,167127323768$
$d_2(a_0^{-1})$	$1,78284243205$
$d_3$	$1,76635702255$
$b(a_0^{-1})$	$2,03625105759$
$C_6(Ka_0^6)$	$0,4616213781 \times 10^6$
$C_8(Ka_0^8)$	$0,4460565781 \times 10^7$
$C_{10}(Ka_0^{10})$	$0,5803352873 \times 10^8$
$C_{12}(Ka_0^{12})$	$0,1031677697 \times 10^{10}$
$C_{14}(Ka_0^{14})$	$0,2415716766 \times 10^{11}$
$C_{16}(Ka_0^{16})$	$0,7191492488 \times 10^{12}$
$\varepsilon/k_B$ (K)	$10,997898$
$d(a_0)$	$4,990672$

Vogel et al. utilizaram também um potencial modificado de Tang e Toennies para ajustar as energias de interação do argônio, cuja expressão é

$$\frac{U(r)}{k_B} = A \exp(a_1 r + a_2 r^2 + a_{-1} r^{-1} + a_{-2} r^{-2}) - \sum_{n=3}^8 \frac{C_{2n}}{r^{2n}} \left( 1 - e^{-br} \sum_{k=0}^{2n} \frac{(br)^k}{k!} \right), \quad (2.71)$$

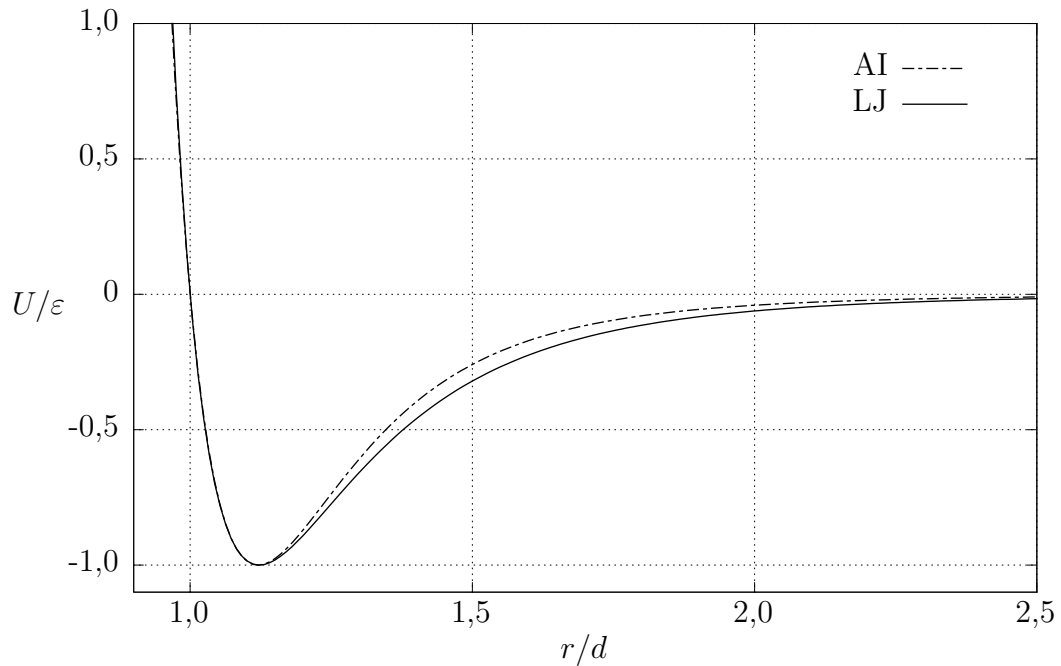
com os parâmetros dados pela Tabela 3.

Os potenciais LJ e AI para o argônio, equações (2.69) e (2.71), estão representados na Figura 6. Embora os potenciais apresentem expressões analíticas bastante diferentes, o comportamento qualitativo deles é muito semelhante, mostrando que o potencial de

Tabela 3 – Parâmetros do potencial *ab initio* para o argônio, equação (2.71). Fonte: [16].

Parâmetro	Valor
$A$ (K)	$4,61330146 \times 10^7$
$a_1$ (nm <sup>-1</sup> )	-29,8337630
$a_2$ (nm <sup>-2</sup> )	-9,71208881
$a_{-1}$ (nm)	$2,75206827 \times 10^{-2}$
$a_{-2}$ (nm <sup>2</sup> )	$-1,01489050 \times 10^{-2}$
$b$ (nm <sup>-1</sup> )	40,2517211
$C_6$ (Knm <sup>6</sup> )	0,442812017
$C_8$ (Knm <sup>8</sup> )	$3,26707684 \times 10^{-2}$
$C_{10}$ (Knm <sup>10</sup> )	$2,45656537 \times 10^{-3}$
$C_{12}$ (Knm <sup>12</sup> )	$1,88246247 \times 10^{-4}$
$C_{14}$ (Knm <sup>14</sup> )	$1,47012192 \times 10^{-5}$
$C_{16}$ (Knm <sup>16</sup> )	$1,17006343 \times 10^{-6}$
$\varepsilon/k_B$ (K)	143,123
$d$ (nm)	0,335741

Lennard-Jones, com os parâmetros  $\varepsilon$  e  $d$  extraídos de medidas de viscosidade, garante uma boa representação da interação intermolecular. No entanto, de modo a evitar a escolha de parâmetros ajustáveis aos dados experimentais, sempre que possível, o potencial *ab initio* deve ser utilizado.

Figura 6 – Potencial interatômico  $U$  em função da distância intermolecular  $r$  para o argônio, equações (2.69) e (2.71).

## 2.7 Dinâmica de colisões binárias

Na teoria cinética, que é a abordagem mais adequada para descrever fenômenos como ondas de choque em gases diluídos, a probabilidade de ocorrência de colisões binárias é muito maior do que a de outros tipos de colisões. Logo, a análise das colisões será restrita a este tipo de interação.

O movimento de duas partículas que interagem devido a um potencial  $U(\mathbf{r})$ , que depende apenas da distância  $\mathbf{r}$  entre seus centros, pode ser tratado como um problema clássico de força central [29, 30]. A dinâmica das colisões binárias envolvendo partículas eletricamente neutras de um gás monoatômico, está ilustrada na Figura 7.

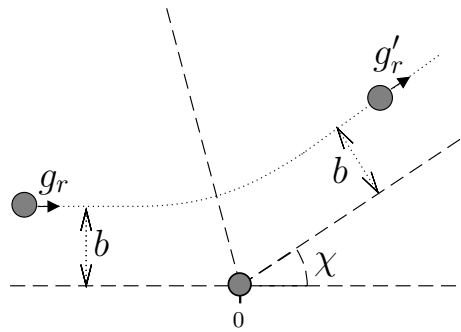


Figura 7 – Esquema de colisão binária onde  $\chi$  é o ângulo de deflexão e  $b$  é o parâmetro de impacto.

Em um referencial no qual a partícula localizada no ponto 0 está em repouso, uma partícula se aproxima com velocidade  $\mathbf{g}_r$ , igual à velocidade relativa  $\mathbf{g}_r = \mathbf{v}_* - \mathbf{v}$ , onde  $\mathbf{v}_*$  e  $\mathbf{v}$  são as velocidades iniciais. A velocidade relativa após a colisão é representada pelo vetor  $\mathbf{g}'_r = \mathbf{v}'_* - \mathbf{v}'$ .

O parâmetro de impacto  $b$  é igual à distância entre as trajetórias das partículas no referencial do centro de massa, e é constante ao longo da colisão. O movimento relativo entre elas está confinado a um plano, chamado plano de colisão, que forma um ângulo  $\epsilon$  com um plano de referência, especificando sua posição no espaço.

Se a colisão é elástica, o que significa que a energia cinética das partículas é conservada, o módulo da velocidade relativa entre elas não é alterado,  $g'_r = g_r$ , apenas a direção do vetor é modificada. O ângulo  $\chi$  entre  $\mathbf{g}_r$  e  $\mathbf{g}'_r$  é chamado de ângulo de deflexão, e é função de  $g_r$  e  $b$ , sendo que sua forma depende da lei de interação molecular. A determinação da forma de  $\chi$  é fundamental na análise da dinâmica das colisões binárias. O estado final das partículas após a colisão é determinado pelas suas velocidades iniciais e pelos ângulos de deflexão  $\chi$  e  $\epsilon$ .

Para o potencial de esferas rígidas, uma colisão ocorre quando as duas partículas da Figura 7 possuem uma distância menor do que um diâmetro molecular  $d$ . Neste caso, o



ângulo  $\chi$  é dado por

$$\chi = 2 \arccos \left( \frac{b}{d} \right). \quad (2.72)$$

Este é o único modelo no qual o ângulo  $\chi$  depende apenas do parâmetro  $b$ .

Para um potencial arbitrário, a expressão para o ângulo  $\chi$  é obtida através da mecânica clássica e sua dedução é encontrada em muitos livros de mecânica clássica, por exemplo [40], e de teoria cinética, como [29] e [30]. De acordo com [26], a expressão para o ângulo de deflexão é

$$\chi = \pi - 2 \int_0^{W_1} \left( 1 - W^2 - \frac{U}{E_r} \right)^{-1/2} dW, \quad (2.73)$$

onde  $W = b/r$ ,  $E_r$  é a energia cinética do movimento relativo, dada por

$$E_r = \frac{mg_r^2}{4}, \quad (2.74)$$

e  $W_1$  é a raiz positiva da equação

$$1 - W^2 - \frac{U}{E_r} = 0. \quad (2.75)$$

$W_1 = b/r_{\min}$  representa o inverso da distância adimensional de maior aproximação entre as partículas. Da equação (2.73) observa-se que  $\chi$ , para um dado potencial  $U$ , é determinado pelo parâmetro de impacto  $b$  e pela energia relativa  $E_r$ . As equações (2.73) e (2.75) podem ser resolvidas numericamente para determinados valores de  $b$  e  $E_r$ , como demonstram Sharipov e Bertoldo [41] para o potencial de Lennard-Jones.

## 3 Revisão bibliográfica

### 3.1 Mecânica dos meios contínuos

De acordo com Salas [42], desde o trabalho de Poisson em 1808 sobre a teoria do som, até o trabalho de Hugoniot em 1887 sobre a teoria das ondas de choque, a falta de fundamentos sólidos em matemática e termodinâmica provocou uma série de dificuldades àqueles que buscavam compreender a formação deste tipo de onda. Foi Rankine, em seu trabalho de 1870 [22] sobre a teoria termodinâmica das ondas de choque, o primeiro a estabelecer corretamente as relações entre as quantidades termodinâmicas antes e depois de uma onda de choque, através das equações de conservação da energia, do momentum e da massa. Conforme explica Krehl [43], o termo onda de choque ainda não era de uso corrente neste período. Rankine utilizava o termo perturbação abrupta (*abrupt disturbance*) e onda de perturbação longitudinal finita (*wave of finite longitudinal disturbance*). Hugoniot utilizava a expressão descontinuidade da velocidade e da pressão do gás (*discontinuité de la vitesse du gaz et de sa pression*).

Hugoniot [23], em seu trabalho publicado em 1889, ao examinar o fenômeno que ocorre quando descontinuidades são introduzidas no movimento, apresentou um resultado que ficou conhecido como a equação de Hugoniot, que relaciona a energia interna à energia cinética de cada lado da descontinuidade. A equação de Hugoniot pode ser obtida eliminando as velocidades na equação da energia (2.18), com o auxílio das equações de conservação da massa, (2.16), e do momentum, (2.17). Ela tem a seguinte forma [18]

$$e_2 - e_1 = \frac{1}{2}(p_2 + p_1)\left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2}\right). \quad (3.1)$$

Porém, como reconheceu Rayleigh em 1910 [44], a equação de Hugoniot era precisamente a mesma obtida por Rankine, mesmo que ambos os autores tenham partido de diferentes pontos de vista. Neste mesmo trabalho, Rayleigh chama a atenção para a espessura das ondas de choque. Sabia-se que se efeitos dissipativos, como viscosidade e condutividade térmica, fossem considerados, as ondas de choque não seriam descontinuidades, mas sim uma mudança brusca, porém contínua, em todas as propriedades termodinâmicas do gás. Ele estima uma espessura da ordem de  $\frac{1}{3} \times 10^{-5}$  cm para ondas de choque no ar sob condições normais, utilizando um valor constante para a viscosidade ( $\mu/\rho = 0,13$  no sistema de unidades C.G.S.).

A partir do estabelecimento por Rankine e Hugoniot das relações termodinâmicas básicas, a estrutura das ondas de choque tem sido estudada teórica e experimentalmente através de diferentes abordagens.

Gilbarg e Paolucci (1953) [4] resolveram numericamente as equações de Navier-Stokes para o problema da estrutura de ondas de choque unidimensionais em gases monoatômicos, para números de Mach entre 1 e 10. Os autores assumiram uma relação entre viscosidade e temperatura da forma  $\mu \propto T^\omega$ , e mostraram como os resultados são sensíveis ao valor de  $\omega$ . Para um mesmo número de Mach a diferença entre as espessuras obtidas para dois valores,  $\omega = 0,82$  e  $\omega = 0,64$ , ultrapassa 40%. Apesar de fornecer uma relação qualitativamente correta entre a espessura da onda e o número de Mach, para números de Mach maiores ou aproximadamente iguais a 2, as equações de Navier-Stokes resultam em espessuras muito menores do que as encontradas através das experiências.

Elizarova et al. (2005) [5] resolveram numericamente as equações de Navier-Stokes para o hélio e para o argônio, a 300 K. A relação entre a inclinação máxima do perfil de densidade e o número de Mach apresenta a tendência esperada, porém os resultados numéricos apresentam grande divergência, acima de 50%, dos resultados experimentais.

## 3.2 Abordagens baseadas na teoria cinética

Mott-Smith (1951) [45] propôs uma solução aproximada na qual assume que, para números de Mach grandes, a função de distribuição de velocidade é bimodal, sendo composta pela soma ponderada de duas maxwellianas, correspondentes às condições uniformes de ambos os lados do choque. A teoria mostrou não ser adequada para números de Mach menores que 2, mas provê resultados satisfatórios para a estrutura de ondas de choque mais intensas. Apesar do método de Mott-Smith ser um dos métodos mais bem-sucedidos, esse tipo de solução envolve a escolha de muitos parâmetros arbitrários para satisfazer a determinados momentos da equação de Boltzmann.

A importância do potencial intermolecular foi enfatizada por Muckenfuss (1962) [46] ao utilizar o método de Mott-Smith com base no potencial de Lennard-Jones. Muckenfuss obteve resultados para a espessura de ondas de choque no argônio e no hélio, dentro da incerteza de  $\pm 5\%$  dos resultados experimentais de Linzer e Hornig [47], para números de Mach entre 2 e 5.

Liepmann et al. (1962) [48] utilizaram o modelo BGK para obter a estrutura de ondas de choque unidimensionais. Nesta aproximação, a integral de colisões na equação de Boltzmann é substituída pela equação modelo proposta por Bhatnagar, Gross e Krook [33]. Utilizando a relação entre viscosidade e temperatura do modelo de Sutherland, eles obtiveram que para Mach 1,5, os perfis de velocidade, temperatura e densidade obtidos a partir do modelo BGK e das equações de Navier-Stokes coincidem, resultando no mesmo valor para a espessura. Para os números de Mach 3, 5 e 10 o modelo BGK reproduz os perfis de densidade, temperatura e velocidade obtidos a partir das soluções de Navier-Stokes na parte de alta pressão do choque, mas aparecem desvios no lado de baixa pressão,

que aumentam conforme o número de Mach aumenta. As ondas de choque também se tornam mais espessas do que a previsão das equações Navier-Stokes e mais assimétricas. No entanto, a inclinação máxima das curvas permaneceu aproximadamente a mesma em ambos os métodos, sendo que a maior diferença encontrada na máxima inclinação da curva de velocidade,  $D_u$ , ocorreu para Mach 10 e atingiu 10%.

Talbot e Sherman (1959) [49] integraram numericamente as equações de Burnett para o caso de ondas de choque unidimensionais, e compararam seus resultados com medidas experimentais no argônio, para números de Mach entre 1,3 e 1,7. As equações de Burnett são derivadas a partir da expansão de Chapman-Enskog de ordem superior. Os autores admitiram uma relação entre viscosidade e temperatura do tipo  $\mu \propto T$ , para uma temperatura próxima à 300 K. A comparação com resultados experimentais para a inclinação máxima do perfil de densidade, indica que os resultados obtidos a partir das equações de Navier-Stokes e Burnett estão dentro da incerteza experimental de  $\pm 5\%$  para números de Mach até aproximadamente 1,4. Acima deste valor, os erros se tornam significativos para a inclinação máxima calculada a partir das equações de Burnett, mas continuam dentro da precisão experimental até Mach 1,7 com as equações de Navier-Stokes. Para números de Mach acima de 1,5, os perfis das ondas de choque obtidos a partir das equações de Burnett começam a apresentar oscilações que se tornam tão intensas próximas à Mach 2, que as soluções perdem o significado físico. Os autores concluem que o esforço empregado no cálculo das equações de Burnett, em detrimento das equações de Navier-Stokes, não se justifica nesta faixa de números de Mach.

Bird (1970) [50] utilizou a simulação direta de Monte Carlo (DSMC) baseado no potencial de centro de repulsão para obter perfis de densidade de ondas de choque unidimensionais em gases monoatômicos. Ele obteve grande concordância com as espessuras de ondas de choque calculadas a partir do modelo bimodal de Mott Smith. Para Mach 8 a diferença entre ambos os métodos ficou abaixo de 5% para o potencial de esferas rígidas. Seus resultados também apresentaram concordância com os resultados experimentais de Schmidt [51]. No entanto, essa concordância pode ser ajustada conforme a escolha do expoente da temperatura. Ele concluiu que para o argônio, o expoente que fornece os melhores resultados em relação à experiência é  $\omega = 0,68$ . Utilizando este expoente na lei de viscosidade-temperatura, Bird reproduziu os mesmos resultados obtidos por Mott-Smith para Mach 8. O autor também conclui que os perfis de densidade devem ser assimétricos, assim como os resultados experimentais apontam, o que não é observado nos perfis obtidos a partir do modelo bimodal, que são sempre simétricos.

Em 1994, Bird [26] compara seus resultados para Mach 2, obtidos a partir do método DSMC baseado no modelo VSS, com os resultados experimentais de Alsmeyer [52] para o argônio. A diferença percentual entre ambos os resultados é de aproximadamente 1% para um valor de  $\omega$  igual a 0,81, que, de acordo com o autor, é o valor adequado para

temperaturas próximas a 300 K. Para números de Mach maiores, a discrepância com os resultados experimentais aumenta, o que exige uma mudança no valor de  $\omega$ . Para Mach 8 o valor que fornece melhor concordância com os resultados experimentais é  $\omega = 0,75$ , o que garante uma diferença percentual abaixo de 5%.

Ohwada (1994) [53] resolveu numericamente a equação de Boltzmann para o potencial de esferas rígidas para números de Mach entre 1, 2 e 3. Para comparação, Ohwada também realizou simulações utilizando o método DSMC e obteve que seus resultados diferiam de apenas 0,5%.

Outros autores apresentam soluções numéricas da equação de Boltzmann para o problema da estrutura das ondas de choque unidimensionais. Dodulad e Tcheremissine (2013) [54] resolveram a equação de Boltzmann utilizando o potencial de Lennard-Jones para o argônio, com uma precisão numérica de  $\pm 3\%$ . Seus resultados apresentam grande concordância com os resultados experimentais de Alsmeyer, obtendo uma diferença de no máximo 5% nos valores das inclinações máximas das curvas de densidade.

### 3.3 Experimentos

O primeiro aparato experimental para o estudo das ondas de choque, o tubo de choque, foi inventado pelo francês Paul Vieille em 1899 e utilizado para demonstrar que os choques se propagam com velocidades superiores à velocidade do som [55]. Porém, é principalmente a partir de 1950 que aparecem os primeiros estudos experimentais sobre a estrutura das ondas de choque. Os experimentos utilizavam diferentes técnicas de identificação da espessura dos choques. Não é objetivo deste trabalho detalhar os procedimentos experimentais.

O método proposto por Cowan e Hornig (1950) [56], consistia em determinar a distribuição de densidade das ondas de choque no gás, através da reflexão de um feixe de luz a partir da superfície do choque. Para um número de Mach igual a 1,3, os autores determinaram uma espessura da ordem de  $10^{-5}$  cm no nitrogênio, com uma precisão de  $\pm 25\%$ . Este mesmo método foi utilizado para calcular a espessura de ondas de choque no argônio por Greene et al. (1950) [57], para números de Mach até aproximadamente 1,40, com um erro estimado de  $\pm 15\%$ . Seus resultados já apontavam para uma boa concordância com trabalhos de Mott-Smith, ainda não publicados na época.

Linzer e Hornig (1963) [47] utilizaram o mesmo método da refletividade, para números de Mach entre 1,70 e 4,85 no argônio. Eles puderam verificar que a espessura da onda diminui até aproximadamente Mach 3,5, quando então volta a aumentar gradualmente. As espessuras calculadas a partir do perfil de densidade das ondas de choque mostraram ser aproximadamente 50% maiores do que as calculadas a partir das equações de Navier-Stokes, utilizando potenciais intermoleculares realísticos, e mostraram boa concordância com o

modelo bimodal de Mott-Smith.

Outro método de medida, baseado na detecção do feixe de elétrons espalhado pelo choque, foi utilizado por Robben e Talbot (1966) [58]. Eles realizaram experiências com o argônio e o hélio, para números de Mach entre 1,5 e 17, com uma incerteza de  $\pm 7\%$ . Seus resultados confirmam que as equações de Navier-Stokes descrevem apropriadamente o comportamento das ondas de choque para números de Mach abaixo de 2 e que a teoria de Mott-Smith é apropriada para números de Mach maiores. Schmidt (1968) [51] utilizando a mesma técnica, obteve a espessura de ondas de choque no argônio, para números de Mach entre aproximadamente 1,5 e 8, com um erro estimado de  $\pm 3,3\%$  para as espessuras. Schmidt aponta o método DSMC desenvolvido por Bird, como o que obteve melhores resultados em relação à experiência para Mach 8, assumindo uma relação entre viscosidade e temperatura  $\mu \propto T^{0,68}$ , apesar de também haver grande concordância com os resultados teóricos de Mott-Smith. Ele também verifica a simetria dos perfis de densidade obtidos por diferentes teorias e pelos seus resultados. Enquanto as equações de Navier-Stokes e o modelo BGK (citando o trabalho de Liepmann et al.) fornecem perfis assimétricos, o método de Mott-Smith fornece perfis exatamente simétricos. Schmidt argumenta que a simetria dos perfis deve ser considerada ao avaliar a validade de uma teoria.

Alsmeyer (1976) [52] utilizou o método de absorção de um feixe de elétrons, com algumas melhorias, para calcular a espessura de ondas de choque no argônio, em um intervalo de números de Mach de 1,55 a 9. A precisão de seus resultados para as inclinações máximas das curvas de densidade é aproximadamente  $\pm 4\%$ , e seus resultados concordam com os resultados de Schmidt em até 1%, exceto para Mach 8, quando a diferença é maior. O autor encontrou que a inclinação atinge o maior valor (ou seja, a espessura é menor) para Mach 3,4, e para números de Mach maiores a inclinação diminui gradativamente. Segundo Alsmeyer os resultados obtidos a partir das equações de Navier-Stokes não seriam adequados nem mesmo para números de Mach próximos a 1,5, pois estimam ondas de choque muito mais finas do que elas realmente são. As equações de Burnett fornecem melhor concordância com os resultados experimentais para Mach 1,55 do que as equações de Navier-Stokes, porém, acima desse valor elas falham completamente em dar qualquer tipo de solução, como já havia sido confirmado por Talbot et al. O modelo BGK fornece resultados semelhantes aos obtidos a partir das soluções de Navier-Stokes, portanto também não concorda com a experiência.

Dos modelos teóricos, o método de Mott-Smith é o que fornece as espessuras das ondas de choque mais próximas às obtidas experimentalmente, porém seus perfis simétricos divergem dos perfis experimentais. Alsmeyer mostra que, surpreendentemente, o método bimodal tem maior concordância para números de Mach menores, até aproximadamente 6, diferente das hipóteses do próprio Mott-Smith e de outros trabalhos publicados anteriormente.

Os experimentos realizados por Alsmeyer confirmaram que a simulação direta de Monte Carlo é o método mais adequado para obter ondas de choque em todo o espectro de números de Mach, tanto em relação às espessuras, quanto em relação à simetria dos perfis da onda. Ele verifica, no entanto, que a concordância com seus resultados para o argônio é melhor para uma relação viscosidade-temperatura  $\mu \propto T^{0,72}$ . Alsmeyer argumenta que Schmidt definiu o melhor valor do expoente  $\omega$  como 0,68, baseado apenas no resultado para Mach 8, exatamente o valor que apresentou maior diferença entre ambos os autores.

## 4 Metodologia

Algumas alternativas para solucionar problemas em dinâmica dos gases foram apresentadas nos capítulos anteriores, como a equação de Boltzmann e as equações de Navier-Stokes. No entanto, a mecânica dos meios contínuos não é adequada para descrever fenômenos em escala molecular, como as ondas de choque, e a complexidade matemática da equação de Boltzmann impossibilita aproximações diretas que levariam à soluções fechadas exatas.

Estas dificuldades levaram ao desenvolvimento de métodos de solução baseados diretamente na simulação dos fenômenos físicos, independentes de modelos matemáticos. Um dos métodos mais conhecidos é a simulação direta de Monte Carlo (Direct Simulation Monte Carlo, DSMC) proposto por Bird [26]. Muitos trabalhos mostram que resultados obtidos através do método DSMC são consistentes com os resultados numéricos obtidos a partir da equação de Boltzmann, como em [53, 59, 60], entre outros.

### 4.1 Simulação Direta de Monte Carlo

Os procedimentos numéricos conhecidos por métodos de Monte Carlo podem ser descritos como métodos de simulação estatística que fazem uso de sequências de números aleatórios (ou randômicos). Na simulação direta de Monte Carlo o processo físico é simulado diretamente, sem que seja necessário escrever as equações macroscópicas que descrevem o comportamento do sistema. É preciso apenas que o sistema físico seja descrito por funções de distribuição de probabilidade conhecidas. A simulação de Monte Carlo realiza amostragens aleatórias dessas distribuições, a partir das quais o comportamento estatístico das variáveis do problema é simulado.

O processo de amostragem das funções de distribuição é feito através da geração de números aleatórios, etapa fundamental dos métodos de Monte Carlo. Em estatística, um número aleatório é aquele que pertence a uma série numérica e que não pode ser previsto a partir dos membros anteriores da série. Números aleatórios gerados por computadores são produzidos a partir de algoritmos reprodutíveis e previsíveis e, portanto, não geram números aleatórios conforme a definição estatística, sendo mais apropriadamente chamados de números pseudo-aleatórios.

A sequência de números obtida a partir de um gerador de números pseudo-aleatórios deve se aproximar de uma verdadeira sequência aleatória e, para tanto, deve ter como características principais: i) seguir uma distribuição uniforme; ii) ter um período de repetição suficientemente grande; iii) a geração deve ser rápida de modo a não comprometer



muitos recursos computacionais.

Métodos de simulação direta simulam o gás real através de um grande número de partículas modelo (geralmente da ordem de  $10^5$  a  $10^7$  partículas), pois usar um número real de partículas é inviável para uma simulação computacional (um litro de gás ideal nas condições normais de temperatura e pressão,  $0^\circ \text{C}$  e  $1 \text{ atm}$ , contém cerca de  $2,7 \times 10^{22}$  partículas). O número de partículas reais representadas por uma partícula modelo é dado por

$$F_N = \frac{N_R}{N} \quad (4.1)$$

onde  $N_R$  é o número de partículas reais e  $N$  é o número total de partículas modelo. O tempo total da simulação é diretamente proporcional ao número de partículas modelo. Na primeira simulação de ondas de choque realizada por Bird, em 1965, o escoamento tinha entre uma e duas mil partículas modelo, e a simulação, em um dos computadores mais rápidos da época, demorava em torno de 30 minutos. Essa mesma simulação nos computadores domésticos atuais demora alguns segundos [61].

No método DSMC, as  $N$  partículas modelo são distribuídas por toda a região do escoamento, que é dividida em uma rede de células cujas dimensões sejam tais que as variações nas propriedades do gás sejam pequenas entre células adjacentes. As posições  $\mathbf{r}_i$  e velocidades  $\mathbf{v}_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ) de cada partícula são, então, armazenadas. O tempo avança em intervalos discretos de tempo  $\Delta t$  nos quais o movimento das partículas modelo e as colisões intermoleculares representativas são desacopladas. Portanto, em cada intervalo de tempo, primeiro as partículas são movimentadas livremente e depois ocorrem as colisões intermoleculares. Um procedimento de indexação garante que as colisões ocorram entre partículas próximas.

O intervalo de tempo da simulação  $\Delta t$  pode ser identificado como o tempo físico no escoamento real, e deve ser pequeno em relação ao livre tempo médio entre as colisões, de forma que os resultados das simulações sejam independentes da escolha do seu valor.

As propriedades macroscópicas do escoamento podem ser obtidas em cada uma das células a partir de médias das propriedades individuais das partículas que nela estão localizadas em determinado instante.

Diferentemente de outros métodos de simulação, o método DSMC possui o mesmo conjunto de suposições da teoria cinética, como a suposição do caos molecular e a restrição a gases diluídos. O método de simulação conhecido como Dinâmica Molecular, consiste na solução numérica das equações clássicas do movimento, e requer uma correspondência de uma para uma entre moléculas simuladas e reais, o que envolve um grande esforço computacional. Além disso, apesar de em Dinâmica Molecular ser possível o uso de procedimentos probabilísticos na definição das configurações iniciais, o cálculo dos movimentos moleculares subsequentes, incluindo colisões e condições de contorno, é determinístico.

## 4.2 Métodos de Amostragem

Se  $x$  é uma variável aleatória contínua que pode assumir qualquer valor no intervalo  $(a, b)$ , e  $f(x)$  a sua função de distribuição, então  $f(x)dx$  é a probabilidade de que a variável  $x$  esteja entre os valores  $x$  e  $x + dx$ . A função  $f(x)$  tem normalização dada por

$$\int_a^b f(x)dx = 1. \quad (4.2)$$

A função de distribuição acumulada é definida como a probabilidade de que a variável aleatória possua um valor menor ou igual a um dado valor  $x$ ,

$$F(x) = \int_a^x f(x')dx'. \quad (4.3)$$

Se  $R_f$  representa um número aleatório qualquer, distribuído uniformemente entre 0 e 1, podemos escrever que

$$F(x) = R_f. \quad (4.4)$$

Cada número aleatório  $R_f$  gerado ao longo da simulação é usado apenas uma vez. Portanto, toda vez que a notação  $R_f$  for utilizada, refere-se a um número aleatório diferente.

Se for possível inverter (4.4), obtém-se um conjunto de valores de  $x$  que satisfazem à função de distribuição  $f(x)$ . Por exemplo, se  $f(x)$  é constante, então, de (4.2),

$$f(x) = \frac{1}{b-a}. \quad (4.5)$$

Substituindo (4.5) em (4.3),

$$F(x) = \frac{x-a}{b-a}, \quad (4.6)$$

e utilizando (4.4), encontra-se o valor de  $x$ ,

$$x = a + R_f(b-a). \quad (4.7)$$

No entanto, este método de amostragem só pode ser utilizado se a expressão (4.4) puder ser invertida. Se  $f(x)$  for uma função mais complexa, cuja função de distribuição acumulada não seja inversível, outro método de amostragem deve ser utilizado.

O método de aceitação-rejeição para seleção de amostras, consiste em escolher aleatoriamente um valor de  $x$ , assumindo-se que ele esteja uniformemente distribuído no intervalo  $(a, b)$ , de acordo com a expressão (4.7). O valor obtido para  $x$  é utilizado para calcular  $f(x)$  e  $f_{\max}$ , que é o maior valor da função de distribuição no intervalo. O valor de  $x$  é então aceito se

$$\frac{f(x)}{f_{\max}} > R'_f, \quad (4.8)$$

onde  $R'_f$  é outro número aleatório. Se a relação (4.8) não for verdadeira, então outro valor de  $x$  é gerado através de (4.7) e o procedimento se repete, cada vez com um  $R_f$  diferente.

### 4.3 Amostragem das componentes da velocidade peculiar do gás em equilíbrio

A velocidade de uma partícula  $v$  em relação à velocidade do escoamento  $u$  é chamada de velocidade peculiar, e é definida como

$$\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}. \quad (4.9)$$

A função de distribuição de uma componente da velocidade peculiar  $V_i$  de um gás em equilíbrio é dada por

$$f_{V_i} = \frac{n}{\sqrt{\pi}v_{mp}} \exp\left(-\frac{V_i^2}{v_{mp}^2}\right), \quad (4.10)$$

onde  $v_{mp}$  é dada por (2.39), e  $V_i$  representa uma componente da velocidade peculiar, podendo ser  $V_x$ ,  $V_y$  ou  $V_z$ .

A primeira componente,  $V_x$ , é obtida através do método de aceitação-rejeição. Seu valor é escolhido aleatoriamente, utilizando-se a expressão (4.7) e o máximo da distribuição (4.10) é calculado, de onde obtém-se  $f_{máx} = n/(\sqrt{\pi}v_{mp})$ . O valor de  $V_x$  é aceito se

$$\frac{f_{V_x}}{f_{máx}} = \exp\left(-\frac{V_x^2}{v_{mp}^2}\right) > R_f. \quad (4.11)$$

Para tornar o procedimento mais eficiente, as demais componentes são obtidas através de um método direto de amostragem de pares de valores.

A densidade de partículas com velocidades dentro do intervalo  $dV_y$  próximo à  $V_y$ , e do intervalo  $dV_z$  próximo à  $V_z$  é

$$f_{V_y} dV_y f_{V_z} dV_z = \frac{1}{\pi v_{mp}^2} \exp\left[-\frac{1}{v_{mp}^2}(V_y^2 + V_z^2)\right] dV_y dV_z, \quad (4.12)$$

Escrevendo (4.12) em coordenadas polares,

$$V_y = V \cos \theta, \quad V_z = V \sin \theta, \quad (4.13)$$

cujo jacobiano é igual a

$$\frac{\partial(V_y, V_z)}{\partial(V, \theta)} = V, \quad (4.14)$$

obtém-se,

$$f_{V_y} dV_y f_{V_z} dV_z = \frac{1}{\pi v_{mp}^2} \exp\left(-\frac{V^2}{v_{mp}^2}\right) V dV d\theta = \exp\left(-\frac{V^2}{v_{mp}^2}\right) d(V^2/v_{mp}^2) \frac{1}{2\pi} d\theta, \quad (4.15)$$

onde  $\exp(-V^2/v_{mp}^2)$  é a função de distribuição da variável  $V^2/v_{mp}^2$  e  $1/2\pi$  é a função de distribuição de  $\theta$ .

A variável  $\theta$  está distribuída uniformemente no intervalo  $(0, 2\pi)$ , portanto, de acordo com (4.7),

$$\theta = 2\pi R_f. \quad (4.16)$$

A variável  $V^2/v_{mp}^2$  está distribuída entre 0 e  $\infty$  e sua função de distribuição acumulada, conforme a definição (4.3), é igual a

$$F(V^2/v_{mp}^2) = \int_0^{V^2/v_{mp}^2} \exp(-V'^2/v_{mp}^2) d(V'^2/v_{mp}^2) = 1 - \exp(-V^2/v_{mp}^2). \quad (4.17)$$

Utilizando (4.4) obtém-se

$$1 - \exp(-V^2/v_{mp}^2) = R_f, \quad (4.18)$$

que pode ser invertida,

$$V = v_{mp} \sqrt{-\ln(1 - R_f)},$$

ou ainda,

$$V = v_{mp} \sqrt{-\ln R_f}, \quad (4.19)$$

onde  $1 - R_f$  foi substituído por  $R_f$ , pois são equivalentes.

Portanto, nesse procedimento de amostragem, os valores  $\theta$  e  $V$  são gerados através das equações (4.16) e (4.19), e os valores das velocidades  $V_y$  e  $V_z$  são obtidos através de (4.13).

## 4.4 Algoritmo

O algoritmo do método DSMC, no esquema denominado NTC (“No Time-Counter”, ou seja, sem contador de tempo), proposto por Bird, no qual a variação do tempo ocorre em passos fixos, possui cinco etapas principais. São elas: i) configuração inicial do escoamento, ii) movimentação livre das partículas, iii) indexação, iv) colisões intermoleculares e v) cálculo das grandezas macroscópicas. Os procedimentos utilizados em cada etapa serão descritos detalhadamente neste capítulo e foram os adotados na elaboração do código desenvolvido para obter os resultados apresentados nesta dissertação.

### 4.4.1 Configuração inicial do escoamento

A configuração geométrica do problema, no referencial da onda de choque, é mostrada na Figura 8. A região de escoamento é dividida em duas partes, cada uma contendo metade do número inicial de partículas. No lado 2 um fluxo uniforme subsônico se desloca com uma velocidade de módulo  $u_2$ , e no lado 1 um fluxo supersônico uniforme se desloca com velocidade de módulo  $u_1$ . Esta definição inicial garante que a onda de choque formada permaneça próxima à posição 0. Toda a região do escoamento é dividida em uma estrutura unidimensional de células, com  $NC$  células de tamanho uniforme igual a  $x/NC$ , onde  $x$  é o tamanho característico do escoamento.

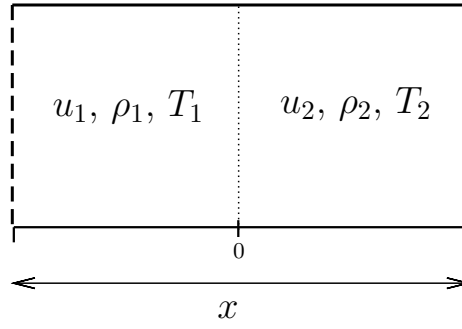


Figura 8 – Configuração dos parâmetros iniciais.

As razões entre as velocidades  $u_2/u_1$ , temperaturas  $T_2/T_1$  e densidades  $\rho_2/\rho_1$  são dadas pelas relações de Rankine-Hugoniot (2.31)-(2.33). Portanto, definindo o número de Mach  $M_1$ , o índice  $\gamma = 5/3$  e conhecidas as condições de um dos lados do choque, as condições do outro fluxo ficam conhecidas.

A velocidade peculiar inicial  $\mathbf{V}$  de cada molécula é definida através dos procedimentos de amostragem descritos. A velocidade de cada molécula na direção do escoamento será  $v_x = V_x + u$ , conforme equação (4.9), e nas demais direções,  $V_y = v_y$  e  $V_z = v_z$ . A posição inicial das partículas no eixo  $x$  é definida aleatoriamente. Apesar de o escoamento ser unidimensional, as três componentes da velocidade são calculadas, pois a colisão é necessariamente um fenômeno tridimensional.

#### 4.4.2 Movimento das partículas

Nesta etapa, as partículas se deslocam no intervalo de tempo  $\Delta t$ , e suas posições iniciais  $x_i$  são substituídas pelas novas posições  $x_f$ , de acordo com a equação

$$x_f = x_i + v_{x,i}\Delta t, \quad (4.20)$$

onde  $v_{x,i}$  indica a velocidade inicial da partícula no eixo  $x$ .

No entanto, a posição final pode ser tal que a partícula acabe fora da região de interesse. Como não existem fronteiras sólidas nesta simulação, a informação sobre a partícula que ficou além dos limites estabelecidos para o escoamento é retirada.

As fronteiras abertas também permitem um fluxo de partículas para dentro da região do escoamento. Portanto, nesta etapa, novas partículas devem ser geradas em ambas as fronteiras, respeitando as condições do gás em cada uma.

A Figura 9 representa uma das fronteiras através da qual ocorre fluxo de partículas. Um fluxo entra na região do escoamento com uma velocidade  $\mathbf{u}$ , que forma um ângulo  $\theta$  com o vetor normal à superfície  $\hat{\mathbf{n}}$ .

Primeiramente é preciso definir o número de partículas que atravessam cada fronteira

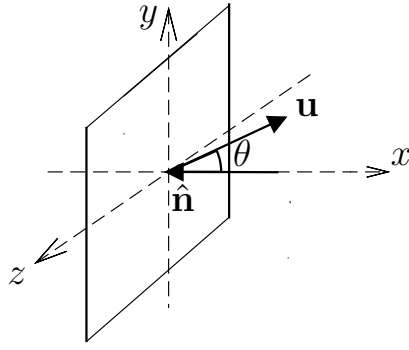


Figura 9 – Fronteira aberta através da qual ocorre fluxo de partículas.

no intervalo de tempo. O fluxo de partículas é dado por

$$J(t, \mathbf{r}) = \int v_x f_b d^3 \mathbf{v}, \quad (4.21)$$

que corresponde ao número de partículas que entram na região do escoamento por unidade de tempo e por unidade de área.  $f_b$  é a distribuição maxwelliana do gás em equilíbrio na fronteira,

$$f_b = n_b \left( \frac{m}{2\pi k_B T_b} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{mV^2}{2k_B T_b} \right), \quad (4.22)$$

onde o índice  $b$  representa as propriedades específicas da fronteira. Como cada fronteira possui condições distintas, a Maxwelliana (4.22) é diferente para cada uma.

Para um fluxo unidimensional,  $\theta = 180^\circ$  na fronteira 1 e  $\theta = 0^\circ$  na fronteira 2. Substituindo (4.22) em (4.21) e realizando a integração para cada fronteira, obtém-se os fluxos

$$J_1 = \frac{n_1 v_{mp1}}{2\sqrt{\pi}} \left\{ \exp \left( -\frac{u_1^2}{v_{mp1}^2} \right) + \frac{\sqrt{\pi} u_1}{v_{mp1}} \left[ 1 + \operatorname{erf} \left( \frac{u_1}{v_{mp1}} \right) \right] \right\}, \quad (4.23)$$

$$J_2 = \frac{n_2 v_{mp2}}{2\sqrt{\pi}} \left\{ \exp \left( -\frac{u_2^2}{v_{mp2}^2} \right) - \frac{\sqrt{\pi} u_2}{v_{mp2}} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{u_2}{v_{mp2}} \right) \right] \right\}, \quad (4.24)$$

onde, conforme a definição (2.39),

$$v_{mp1} = \sqrt{\frac{2k_B T_1}{m}} \quad \text{e} \quad v_{mp2} = \sqrt{\frac{2k_B T_2}{m}},$$

e  $\operatorname{erf}(u)$  é a função erro, definida como

$$\operatorname{erf}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^u e^{-v^2} dv. \quad (4.25)$$

O número total de partículas  $N_e$  que entram na região do escoamento através do elemento de área  $A$  no intervalo de tempo  $\Delta t$ , é obtido através da expressão

$$N_e = JA\Delta t. \quad (4.26)$$

Uma vez definido o número de partículas que entram através das fronteiras, o próximo passo é determinar as três componentes da velocidade de cada nova partícula. As componentes da velocidade que são paralelas à fronteira (Figura 9) obedecem à distribuição de velocidades do gás estacionário, e o par de componentes  $v_y$  e  $v_z$  é obtido através das equações (4.16) e (4.18), considerando as condições específicas de cada fronteira. A componente normal à fronteira  $v_x$  depende da componente da velocidade hidrodinâmica normal à superfície  $u$  e é calculada como

$$v_x = u + V_x. \quad (4.27)$$

A função de distribuição da componente normal da velocidade peculiar  $V_x$ , é obtida a partir de (4.21) e (4.22), e tem a forma

$$f_{V_x} \propto \frac{(V_x + u)}{v_{mp}} \exp\left(-\frac{V_x^2}{v_{mp}^2}\right). \quad (4.28)$$

De modo a gerar as componentes da velocidade dessa distribuição, um procedimento de aceitação-rejeição é necessário. O máximo da distribuição (4.28) é encontrado fazendo

$$\frac{\partial f_{V_x}}{\partial V_x} = 0, \quad (4.29)$$

de onde obtém-se

$$V_x = \frac{\sqrt{u^2 + 2v_{mp}^2} - u}{2}. \quad (4.30)$$

A razão  $f_{V_x}/f_{máx}$  é igual a

$$\frac{f_{V_x}}{f_{máx}} = \frac{2(V_x + u)}{u + \sqrt{u^2 + 2v_{mp}^2}} \exp\left[\frac{1}{2} + \frac{u}{2v_{mp}^2} \left(u - \sqrt{u^2 + 2v_{mp}^2}\right) - \left(\frac{V_x}{v_{mp}}\right)^2\right]. \quad (4.31)$$

Se  $f_{V_x}/f_{máx} > R_f$  a velocidade da partícula  $v_x$  é obtida através da expressão (4.27).

### 4.4.3 Indexação

Esta etapa é fundamental para o cálculo das grandezas macroscópicas e para que as colisões intermoleculares ocorram apenas entre partículas próximas. O procedimento de indexação consiste na organização das partículas pelo número de sua célula e na contagem do número de partículas por célula. Após cada etapa de movimentação, a célula ocupada pela partícula é atualizada.

### 4.4.4 Colisões intermoleculares

No método DSMC o movimento das partículas e a interação intermolecular são etapas desacopladas. Feito o processo de indexação, as colisões ocorrem entre partículas que ocupam a mesma célula.

A frequência de colisão de uma partícula real  $\nu$  é definida como o número de colisões por unidade de tempo e por unidade de volume. Se  $n$  é o número de moléculas por unidade de volume, o número total de colisões no intervalo de tempo  $\Delta t$ , dentro da célula de volume  $V_c$  será

$$N_{col} = \frac{1}{2}n\nu V_c \Delta t, \quad (4.32)$$

onde o fator  $1/2$  se deve ao fato de cada colisão envolver duas partículas.

Supondo que existam  $n$  moléculas por unidade de volume, e que todas estão em repouso, exceto uma, que se move com velocidade  $g_r$  em relação às demais, em um intervalo de tempo  $\Delta t$ , a partícula que se move irá colidir com qualquer partícula do gás que estiver dentro do volume  $\sigma_t g_r \Delta t$ , onde  $\sigma_t$  é sua seção de choque total. Esta expressão é válida para  $\sigma_t$  constante, como no caso do modelo HS, ou para qualquer outro potencial com um parâmetro de impacto limite. A frequência de colisão por molécula é, portanto,

$$\nu = n\sigma_t \bar{g}_r, \quad (4.33)$$

onde  $\bar{g}_r$  é velocidade molecular média em relação a todas as moléculas com as quais a partícula interage no intervalo de tempo. Portanto, substituindo (4.33) em (4.32), obtém-se

$$N_{col} = \frac{1}{2}n^2\sigma_t \bar{g}_r V_c \Delta t. \quad (4.34)$$

Substituindo  $n = N_R/V_c$ , onde  $N_R$  é o número de partículas reais, e utilizando (4.1),

$$N_{col} = \frac{N^2 F_N^2 \sigma_t \bar{g}_r \Delta t}{2V_c}, \quad (4.35)$$

onde  $N$  é o número de partículas modelo que ocupam a célula no intervalo de tempo.

A expressão (4.34) dá o número de colisões reais que ocorrem por célula. O número de colisões entre partículas modelo,  $N_{colM}$ , é igual a  $N_{col}/F_N$ ,

$$N_{colM} = \frac{N^2 F_N \sigma_t \bar{g}_r \Delta t}{2V_c}. \quad (4.36)$$

A expressão (4.36) envolve o cálculo da velocidade média relativa de todas as partículas modelo na célula,  $\bar{g}_r$ . Como esse procedimento envolve um grande esforço computacional, calcula-se o número máximo de colisões possíveis por célula, substituindo  $\bar{g}_r$  pela velocidade relativa máxima  $g_{r,m\acute{a}x}$ ,

$$N_{colM}^{m\acute{a}x} = \frac{N^2 F_N \sigma_t g_{r,m\acute{a}x} \Delta t}{2V_c}. \quad (4.37)$$

Substituindo a expressão para a seção de choque total  $\sigma_t = \pi b_{m\acute{a}x}^2$ , a equação (4.37) tem a forma

$$N_{colM}^{m\acute{a}x} = \frac{N^2 F_N \pi b_{m\acute{a}x}^2 g_{r,m\acute{a}x} \Delta t}{2V_c}, \quad (4.38)$$



onde  $b_{m\acute{a}x}$  é o próprio diâmetro molecular  $d$  para o modelo HS ou o parâmetro de impacto limite para um potencial arbitrário.

Os  $N_{colM}^{m\acute{a}x}$  pares de colisão são escolhidos aleatoriamente dentro das células, independentemente de suas velocidades relativas. O módulo da velocidade relativa de cada par  $g_r$  é então calculado, e para um par ser aceito um procedimento de aceitação-rejeição é utilizado, onde apenas os pares cuja velocidade relativa satisfaz a condição

$$\frac{g_r}{g_{r,m\acute{a}x}} > R_f, \quad (4.39)$$

são aceitos para colisão.

A variável  $g_{r,m\acute{a}x}$  é inicialmente definida com um valor suficientemente alto, e ao longo da etapa de colisão, se houver pares com velocidades relativas maiores, seu valor deve ser atualizado. Este procedimento, utilizando as equações (4.38) e (4.39), é computacionalmente mais eficiente do que usar a equação (4.36), porém ambos os procedimentos são equivalentes.

Aceito o par para colisão, as velocidades após a interação podem ser determinadas. As componentes da velocidade relativa são obtidas através de

$$\mathbf{g}_r = \mathbf{v}_* - \mathbf{v}, \quad (4.40)$$

onde  $\mathbf{v}$  e  $\mathbf{v}_*$  são as velocidades iniciais das partículas. A velocidade do centro de massa  $\mathbf{G}$ , que permanece constante ao longo da colisão, é dada por

$$\mathbf{G} = \frac{\mathbf{v}_* + \mathbf{v}}{2}. \quad (4.41)$$

Os dois parâmetros de impacto necessários para especificar a colisão são a distância  $b$  e o ângulo azimutal  $\epsilon$ . O procedimento de amostragem utilizado para gerar este par de parâmetros é semelhante ao demonstrado na seção 4.2. A variável  $b$  está distribuída entre 0 e  $b_{m\acute{a}x}$  conforme a função de distribuição

$$f(b) = \frac{2b}{b_{m\acute{a}x}^2}. \quad (4.42)$$

A função de distribuição acumulada é calculada através da equação (4.3) e o valor de  $b$  é obtido a partir da equação (4.4),

$$b = b_{m\acute{a}x} \sqrt{R_f}. \quad (4.43)$$

O ângulo  $\epsilon$  está uniformemente distribuído entre 0 e  $2\pi$  e é calculado a partir da expressão (4.7) que resulta em

$$\epsilon = 2\pi R_f. \quad (4.44)$$

As velocidades antes e depois da colisão estão relacionadas através do ângulo de deflexão  $\chi$ , de acordo com esquema da Figura 7. Para o potencial de esferas rígidas, o

ângulo de deflexão é dado pela equação (2.72). Para um potencial arbitrário, o ângulo  $\chi$  depende do parâmetro  $b$  e da energia cinética do movimento relativo  $E_r$ , e é dado por (2.73).

Devido ao elevado número de colisões, o cálculo do ângulo  $\chi$  para cada interação demanda um grande esforço computacional. De modo a contornar esta dificuldade, o procedimento de obtenção dos ângulos  $\chi$  seguirá o esquema proposto por Sharipov e Strapasson [9, 62], que consiste em calcular e armazenar previamente na memória do computador uma matriz de valores discretos de ângulos  $\chi_{ij} = \chi(b_i, E_{r,j})$  para os valores discretos de  $b_i$  e  $E_{r,j}$ . Nesta matriz os valores da energia estão uniformemente distribuídos entre 0 e  $E_{máx}$ , de acordo com

$$E_{r,j} = (j - 0,5) \frac{E_{máx}}{N_E}, \quad 1 \leq j \leq N_E. \quad (4.45)$$

$N_E$  é um número inteiro que corresponde ao número de valores de energia. Os  $N_b$  valores do parâmetro de impacto  $b$  estão distribuídos de forma que sejam igualmente prováveis, e utilizando (4.43),

$$b_1 = \frac{b_{máx}}{\sqrt{2N_b}}, \quad b_i = \sqrt{b_{i-1}^2 + \frac{b_{máx}^2}{N_b}}. \quad (4.46)$$

Quando os valores de  $b_i$  e  $E_j$  são escolhidos, a matriz  $\chi_{ij}$  é calculada através da expressão (2.73) e armazenada na memória do computador. Para selecionar um valor da matriz para uma dada colisão, utiliza-se a regra

$$i = N_b R_f + 1, \quad j = \frac{E_r}{E_{máx}} N_E + 1, \quad (4.47)$$

de modo que o índice  $i$  está uniformemente distribuído entre 1 e  $N_b$ , e o índice  $j$  corresponde aos valores discretos de  $E_{r,j}$  mais próximos da energia relativa  $E_r$  da colisão específica, onde  $E_r = mg_r/4$ .

Os valores utilizados para gerar as matrizes  $\chi_{ij}$  são apresentados na Tabela 4. Os valores estão apresentados em termos de grandezas adimensionais, sendo  $k_B T_1$  a unidade de energia, e o parâmetro de impacto é dado em termos de  $d$ , que corresponde à distância na qual o potencial é zero, ou seja,  $U(d) = 0$ .

Tabela 4 – Valores para os parâmetros da matriz  $\chi_{ij}$ ,  $T_1 = 300$  K.

Argônio				Hélio			
$N_b$	$N_E$	$b_{máx}/d$	$E_{máx}/(k_B T_1)$	$N_b$	$N_E$	$b_{máx}/d$	$E_{máx}/(k_B T_1)$
900	1500	3	57	900	2500	2,5	92
900	2500	3	95	900	6000	3	200
900	4000	3	191	500	5000	3	250
900	6000	3	286				

Devido ao amplo espectro de números de Mach simulados, diversos valores de energia máxima adimensional foram testados, de modo a encontrar o valor ideal para cada situação. Os valores de  $N_E$  e  $N_b$  também foram testados, até que não houvesse mudança nos resultados dentro da precisão desejada.

O valor do parâmetro de impacto limite  $b_{m\acute{a}x}$  deve ser escolhido cuidadosamente, pois o número de pares de colisão, equação (4.38), depende diretamente do seu valor. De acordo com Sharipov et al. [9], para valores altos de energia, o ângulo de deflexão  $\chi$  tende rapidamente a zero e  $b_{m\acute{a}x}$  pode ser pequeno. Para  $T_1 = 300$  K no hélio, quando  $b_{m\acute{a}x} = 2d$ , o ângulo de deflexão é praticamente zero. Logo, os valores utilizados para gerar as matrizes para este gás,  $b_{m\acute{a}x} = 2,5d$  e  $b_{m\acute{a}x} = 3d$  são suficientes. O mesmo procedimento para o argônio mostra que utilizar valores acima de  $b_{m\acute{a}x} = 3d$  não influencia nos resultados dentro da precisão de 0,5% [10].

Definido o ângulo de deflexão  $\chi$  e o ângulo azimutal  $\epsilon$ , as componentes da velocidade relativa após a colisão  $\mathbf{g}'_r = (g'_x, g'_y, g'_z)$ , conforme demonstrado por [26], são obtidas a partir das expressões

$$g'_x = g_x \cos \chi + \sqrt{g_y^2 + g_z^2} \sin \epsilon \sin \chi, \quad (4.48)$$

$$g'_y = g_y \cos \chi + \frac{g_r g_z \cos \epsilon - g_x g_y \sin \epsilon}{\sqrt{g_y^2 + g_z^2}} \sin \chi, \quad (4.49)$$

$$g'_z = g_z \cos \chi - \frac{g_r g_y \cos \epsilon + g_x g_z \sin \epsilon}{\sqrt{g_y^2 + g_z^2}} \sin \chi. \quad (4.50)$$

As velocidade finais das duas partículas interagentes,  $\mathbf{v}'_*$  e  $\mathbf{v}'$ , são calculadas com a ajuda das expressões (4.40) e (4.41),

$$\mathbf{v}'_* = \mathbf{G} + \frac{\mathbf{g}'_r}{2}, \quad (4.51)$$

$$\mathbf{v}' = \mathbf{G} - \frac{\mathbf{g}'_r}{2}. \quad (4.52)$$

#### 4.4.5 Cálculo das grandezas macroscópicas

As propriedades macroscópicas são determinadas através do cálculo das médias das quantidades moleculares dentro de cada célula. Em geral, as médias começam a ser tomadas após um tempo determinado em que o escoamento estacionário se estabelece e as flutuações estatísticas diminuem.

A densidade é obtida através do número de partículas reais  $NF_N$ , dividido pelo volume  $V_c$  de cada célula

$$\rho = \frac{mNF_N}{V_c}. \quad (4.53)$$

A velocidade média das partículas na célula, ou seja, a velocidade hidrodinâmica  $\mathbf{u}$  é dada por

$$\mathbf{u} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{v}_i. \quad (4.54)$$

A temperatura é calculada a partir das velocidades das partículas na célula. A energia cinética média associada ao movimento de agitação térmica é igual a

$$\frac{3}{2} k_B T = \frac{1}{2} m \overline{V^2},$$

onde  $\overline{V}$  é a velocidade peculiar média,  $\overline{V} = \overline{\mathbf{v}} - \mathbf{u}$ . Portanto, a temperatura translacional é obtida através de

$$T = \frac{2}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N \frac{m(\mathbf{v}_i - \mathbf{u})^2}{2}. \quad (4.55)$$

Moléculas monoatômicas possuem apenas energia de translação, portanto a temperatura do gás é dada apenas pela temperatura translacional.

## 4.5 Parâmetros da simulação

O número inicial de partículas simuladas  $N$  foi definido como  $10^7$ . Porém, por se tratar de um problema com fronteiras abertas, esse número oscila em cada intervalo de tempo. O número de células  $NC$  é igual a 1000, logo, existem aproximadamente  $10^4$  partículas por célula em cada  $\Delta t$ . O intervalo de tempo é igual a  $\Delta t = 0,002\ell/v_{mp}$ .

As amostras começam a ser obtidas depois que o escoamento estacionário é estabelecido. O tempo para estabelecer o escoamento estacionário depende do número de Mach. Ondas de choque com  $M_1 = 1,1$  precisam de um tempo aproximadamente 80 vezes maior do que uma onda de choque com  $M_1 = 10$ , antes que as amostras comecem a ser tomadas. Esse tempo foi testado antes que se chegasse aos valores finais utilizados. O tempo total do escoamento também variou conforme o número de Mach, entre  $800\ell/v_{mp}$  e  $50\ell/v_{mp}$ .

Todos os parâmetros do escoamento foram testados, de modo que suas escolhas não influenciassem nos resultados finais (a análise da influência dos parâmetros da simulação é feita na Seção 5.3). Apenas os valores do tamanho adimensional característico do escoamento  $x/\ell_1$  e da energia máxima adimensional  $E_{max}/(k_B T_1)$  apresentaram influência significativa sobre os resultados e precisaram ser modificados para diferentes números de Mach. O valor final utilizado para estes parâmetros é apresentado na Tabela 5.

As dimensões da matriz  $\chi$ ,  $N_E$  e  $N_b$ , para cada  $E_{max}$ , são dadas pela Tabela 4. A temperatura de equilíbrio do escoamento supersônico é  $T_1 = 300$  K, em todas as simulações. Nesta temperatura, a viscosidade do argônio é igual  $22,669 \mu\text{Pa}\cdot\text{s}$  [11], e do hélio  $19,910 \mu\text{Pa}\cdot\text{s}$  [12].

Tabela 5 – Valores finais para os parâmetros do escoamento. Os demais valores são  $N = 10^7$ ,  $\Delta t = 0,002\ell/v_{mp}$  e  $NC = 1000$ .  $T_1 = 300$  K.

$M_1$	Argônio		Hélio	
	$x/\ell_1$	$E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1)$	$x/\ell_1$	$E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1)$
1, 1	60	57	60	92
2	40	57	40	92
3	20	57	20	92
4	20	95	20	200
5	20	191	20	200
6	20	286	20	250
7	20	286	20	250
8	20	286	20	250
9	40	286	40	250
10	40	286	40	250

## 4.6 Erros

A medida da dispersão de um conjunto de dados é determinada pelo desvio padrão. Seja uma amostra de  $n_a$  elementos, composta pelas variáveis aleatórias  $z_i$  ( $i = 1, \dots, n_a$ ), o desvio padrão amostral  $\sigma_{z_i}$  é dado por

$$\sigma_{z_i}^2 = \frac{1}{n_a - 1} \sum_{i=1}^{n_a} (z_i - \bar{z})^2, \quad (4.56)$$

onde a média da amostra é obtida através de

$$\bar{z} = \frac{1}{n_a} \sum_{i=1}^{n_a} z_i. \quad (4.57)$$

Se as diferentes observações da amostra (os  $z_i$ ) são variáveis aleatórias independentes, com distribuição igual à distribuição da população, então,

$$\sigma_{\bar{z}} = \frac{\sigma_{z_i}}{\sqrt{n_a}}, \quad (4.58)$$

é o desvio padrão da média da amostra, ou erro padrão da média [63]. O erro  $\sigma_{\bar{z}}$  diminui de forma proporcional ao inverso da raiz quadrada do número de pontos da amostra,  $\sigma_{\bar{z}} \propto 1/\sqrt{n_a}$ . Portanto, no método DSMC, é possível reduzir o erro estatístico ao valor que se desejar, aumentando o tamanho da amostra.

Os parâmetros do método DSMC são as principais fontes de erro, enquanto a discretização do ângulo de deflexão tem pouca contribuição sobre a incerteza total.

O potencial *ab initio* também é uma fonte de erro. Este potencial é o resultado da solução de uma equação diferencial, resolvida com um certo erro, que causa erro nos cálculos das inclinações dos perfis das ondas de choque. Pode-se usar como estimativa do erro do potencial as medidas de viscosidade realizadas utilizando os potenciais *ab initio*.

Vogel et al. [16] compararam os valores de viscosidade calculados *ab initio* com as medidas experimentais no argônio à baixa densidade. A comparação mostrou que os valores concordam em até  $\pm 0,1\%$ , mostrando que seus resultados estão em melhor concordância com os resultados experimentais do que qualquer outro potencial *ab initio*. Da mesma forma, de acordo com o artigo de Bich et al. [14], a viscosidade calculada para o hélio foi obtida com incerteza de  $\pm 0,02\%$ .

Assumindo que o potencial influencia os perfis das ondas de choque, e, consequentemente, a inclinação das curvas na mesma medida que influencia a viscosidade dos gases, considera-se que os erros devidos aos potenciais são  $0,02\%$  para hélio e  $0,1\%$  para argônio.

## 5 Resultados

Foram realizados cálculos numéricos para números de Mach  $M_1$  no intervalo de 1,1 a 10, para uma temperatura de  $T_1 = 300$  K. Dois potenciais foram simulados, o potencial HS (2.63) e o potencial AI para os gases monoatômicos argônio (2.71) e hélio (2.70).

### 5.1 Campo de escoamento

As distribuições de densidade  $\rho$ , temperatura  $T$  e velocidade hidrodinâmica  $u$  ao longo do eixo  $x$ , para o argônio, são apresentadas nas Figuras 10, 11 e 12, respectivamente, para os potenciais HS e AI. Todas as propriedades estão normalizadas em termos das propriedades do escoamento supersônico  $\rho_1$ ,  $T_1$  e  $\ell_1$ .

Na passagem do fluxo supersônico para o fluxo subsônico, os perfis das ondas apresentam uma variação abrupta nas propriedades termodinâmicas do gás, da ordem de 3 a 4 livres caminhos equivalentes. Os perfis de densidade do potencial AI são assimétricos, como indicam os resultados experimentais de Alsmeyer [52] e Schmidt [51].

Para  $M_1 = 1,1$ , os perfis das propriedades obtidos através de ambos os potenciais são muito semelhantes e as curvas se sobrepõem. A partir de Mach 2, principalmente no lado de baixa pressão, onde o escoamento tem velocidade supersônica, as curvas AI apresentam desvios progressivamente maiores das curvas HS, conforme a intensidade do choque aumenta. Estes desvios são melhor visualizados nos perfis de temperatura, Figura 11, e velocidade, Figura 12.

Alguns dados numéricos utilizados para obter os perfis das Figuras 10, 11 e 12 são apresentados no Apêndice A.

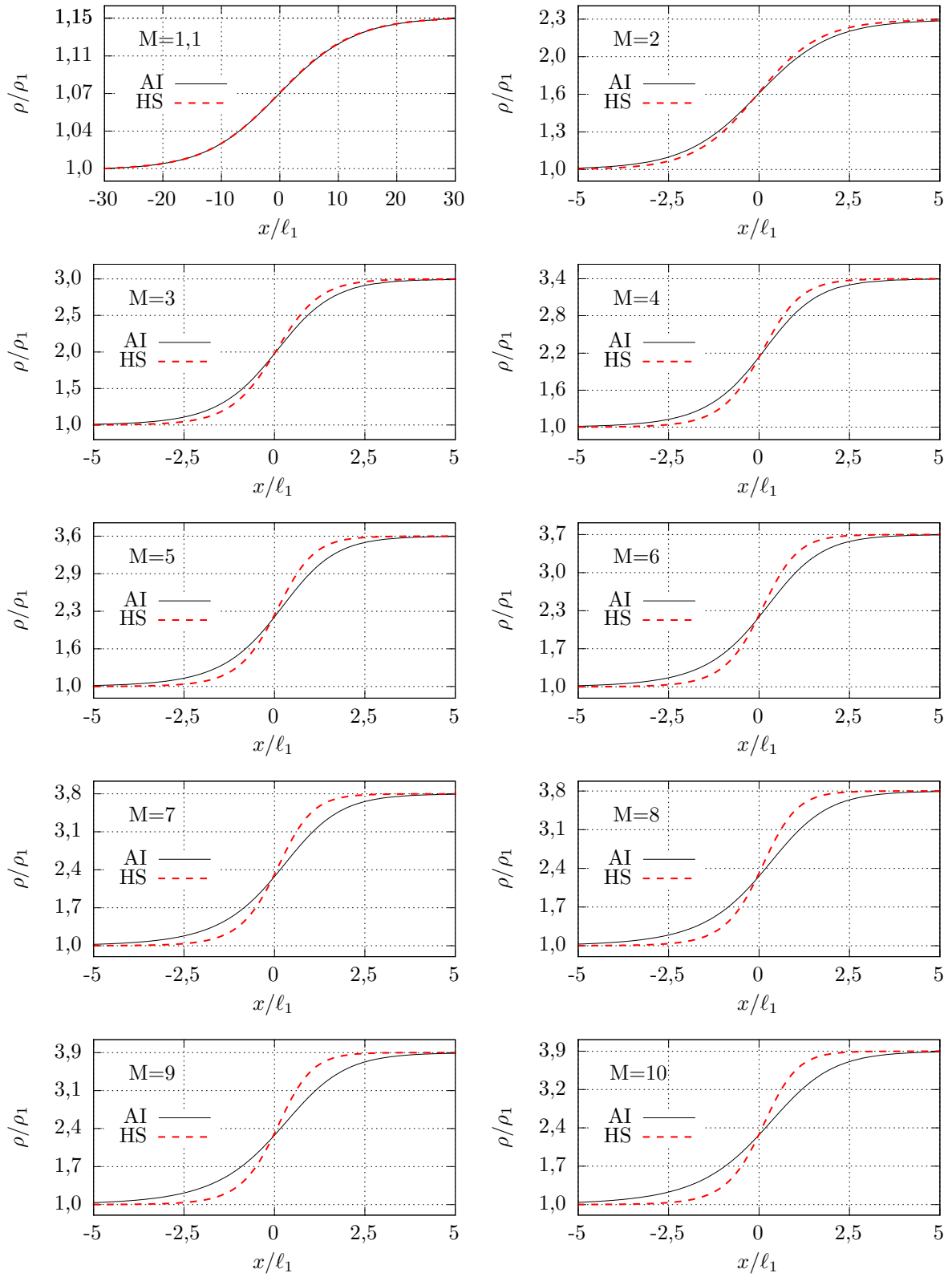


Figura 10 – Campo de densidade do argônio para os potenciais *ab initio* (AI) e esferas rígidas (HS).



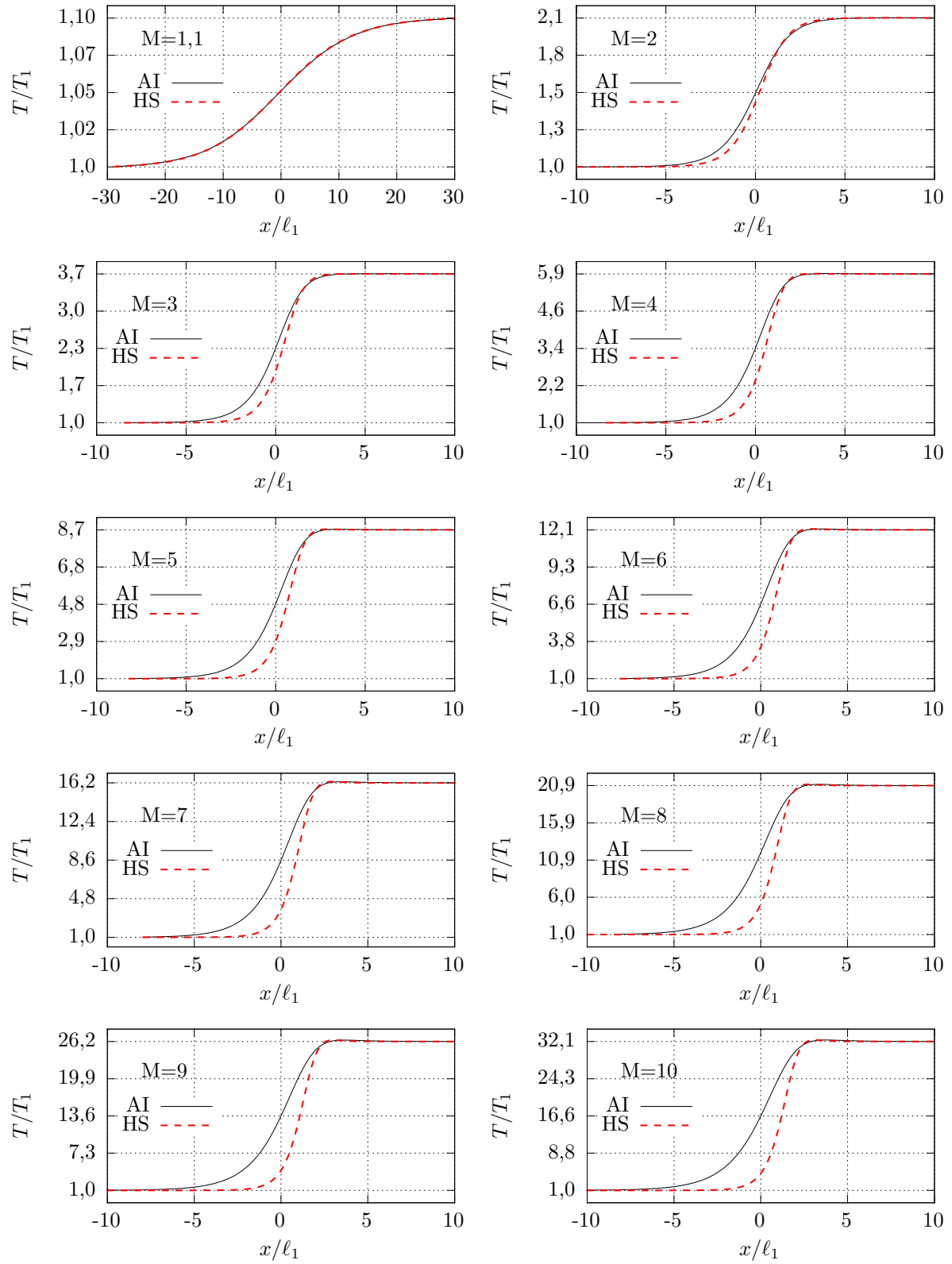


Figura 11 – Campo de temperatura do argônio para os potenciais *ab initio* (AI) e esferas rígidas (HS).

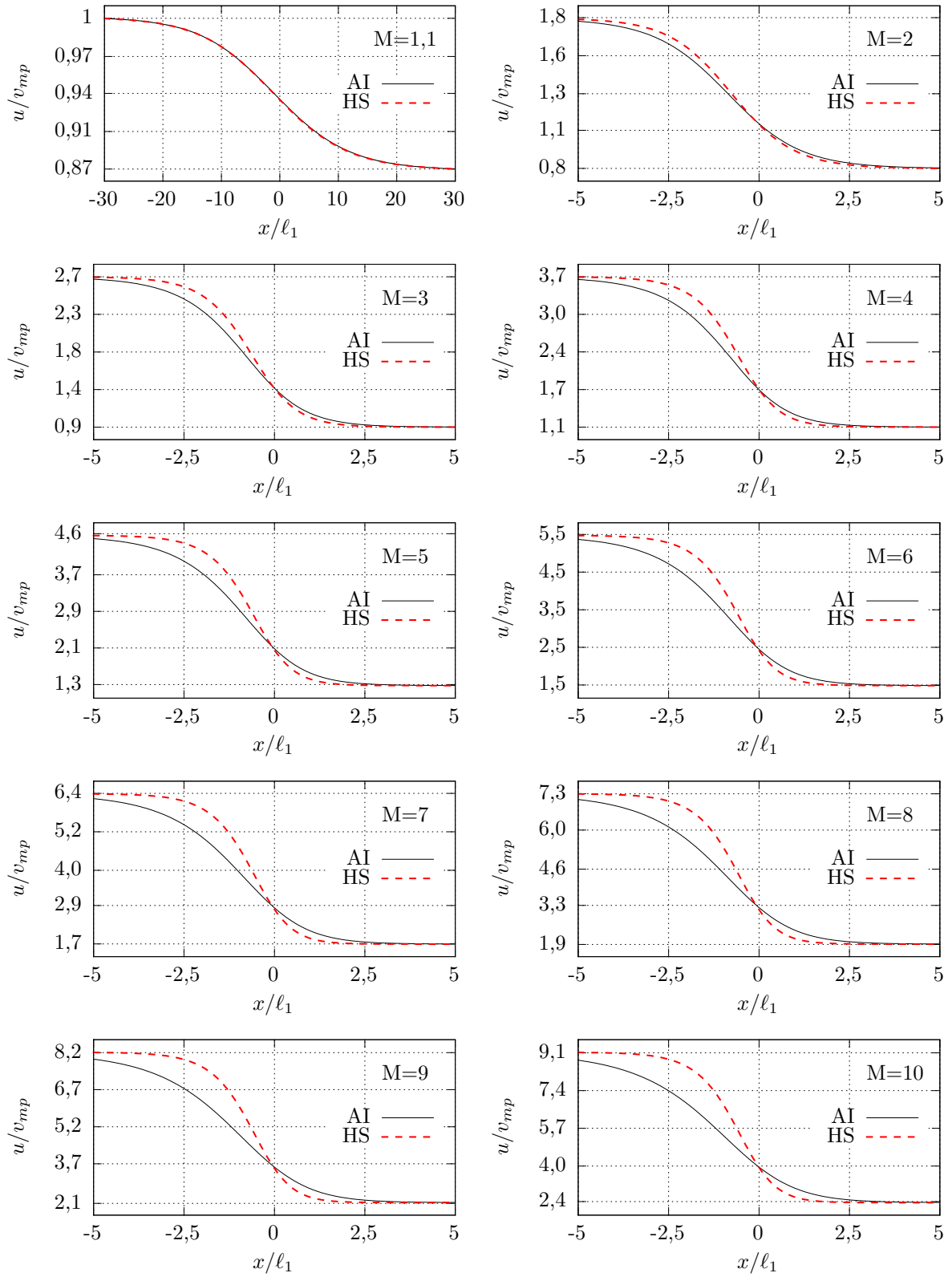


Figura 12 – Campo de velocidade do argônio para os potenciais *ab initio* (AI) e esferas rígidas (HS).

## 5.2 Inclinação máxima

A inclinação adimensional máxima dos perfis das propriedades termodinâmicas  $D$ , definida pela expressão (2.41) e pela Figura 4, é o parâmetro de referência utilizado no estudo da estrutura das ondas de choque. As inclinações  $D_\rho$ ,  $D_T$  e  $D_u$ , são calculadas através do ajuste das curvas de densidade, temperatura e velocidade, Figuras 10, 11 e 12. A função de ajuste é o polinômio

$$y(x) = a + bx + cx^2 + dx^3, \quad (5.1)$$

onde  $a$ ,  $b$ ,  $c$  e  $d$  são os coeficientes de ajuste, e o intervalo de  $x$  é escolhido na região onde o perfil é praticamente uma reta. Obtidos os coeficientes, para encontrar a inclinação máxima adimensional  $D$ , iguala-se a segunda derivada de (5.1) à zero, de onde obtém-se  $x_0$ ,

$$\frac{d^2y}{dx^2} = 2c + 6dx_0 = 0 \Rightarrow x_0 = -\frac{c}{3d}, \quad (5.2)$$

que é o ponto onde a primeira derivada, dada por

$$\frac{dy}{dx} = b + 2cx + 3dx^2, \quad (5.3)$$

tem um valor máximo. Substituindo o valor de  $x_0$  da equação (5.2) em (5.3), obtém-se a expressão da derivada máxima

$$\left| \frac{dy}{dx} \right|_{m\acute{a}x} = b - \frac{c^2}{3d}. \quad (5.4)$$

A equação (5.4) é então substituída em (2.41) e o valor de  $D$  é encontrado.

Por exemplo, para  $M_1 = 2$  no argônio, o intervalo onde o perfil de densidade é uma reta ocorre entre os pontos  $x/\ell = -0,5$  e  $x/\ell = 0,5$ , como mostra a Figura 13, para o potencial AI. Os coeficientes de ajuste de  $y(x)$  neste intervalo são

$$a = 1,6468, \quad b = 0,3158, \quad c = -0,0058 \quad \text{e} \quad d = -0,0182.$$

A partir da curva ajustada, substituindo os coeficientes na expressão (5.2), encontra-se  $x_0/\ell = -0,1058$ , e de (5.4), obtém-se  $|dy(x_0/\ell)/dx| = 0,3164\rho_1$ . Das condições de Rankine-Hugoniot, equação (2.33), tem-se que  $\rho_2/\rho_1 = 2,2857$ , portanto,  $\rho_2 - \rho_1 = 1,2857\rho_1$ . A inclinação máxima adimensional da curva de densidade é obtida através de (2.41), que resulta em  $D_\rho = 0,3164/1,2857 = 0,2461$ .

Os valores numéricos das inclinações máximas dos perfis das ondas de choque, obtidos através do potencial HS e do potencial AI para o hélio (He) e para o argônio (Ar), são mostrados nas Tabelas 6, 7 e 8.

Para o potencial AI, a inclinação de todas as curvas cresce a partir de  $M_1 = 1,1$  até atingir um valor máximo. Para o argônio a inclinação máxima ocorre em  $M_1 = 4$ , nas

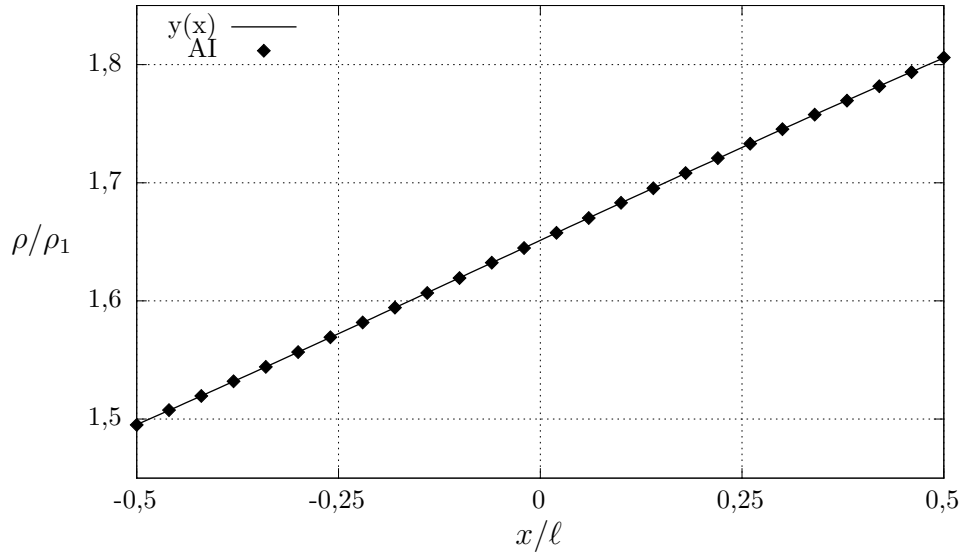


Figura 13 – Pontos calculados e a curva de ajuste para a densidade adimensional,  $M_1 = 2$ .

Tabela 6 – Inclinação máxima adimensional dos perfis de densidade para os potenciais HS e AI para o hélio (He) e o argônio (Ar).

$M_1$	$D_\rho$		
	HS	AI (He)	AI (Ar)
1,1	0,04001	0,03968	0,03940
2	0,2872	0,2594	0,2461
3	0,4009	0,3254	0,3078
4	0,4483	0,3299	0,3181
5	0,4713	0,3170	0,3136
6	0,4844	0,3002	0,3044
7	0,4919	0,2824	0,2938
8	0,4974	0,2660	0,2838
9	0,5007	0,2504	0,2733
10	0,5031	0,2366	0,2641

curvas de densidade e temperatura, e em  $M_1 = 3$  na curva de velocidade. Para o hélio a inclinação é máxima em  $M_1 = 4$  na curva de densidade e em  $M_1 = 3$  nas demais. A espessura da onda de choque atinge, portanto, um valor mínimo igual a  $L/\ell_1 \equiv 1/D \approx 3$ , em todos esses casos. Depois de atingir a inclinação máxima, as curvas se tornam menos inclinadas conforme o número de Mach aumenta. Isso implica no aumento da espessura de ondas de choque mais intensas, chegando a um valor de  $L/\ell_1 \approx 4$  em Mach 10.

Para o potencial HS, a inclinação cresce monotonicamente desde  $M_1 = 1,1$  até 10, quando atinge uma espessura de aproximadamente  $2\ell_1$ . Para  $M_1 = 1,1$  a diferença percentual entre as inclinações obtidas com ambos os potenciais é de cerca de 1%, porém essa diferença aumenta para os demais valores de  $M_1$  e atinge 70% para Mach 10 no

Tabela 7 – Inclinação máxima adimensional dos perfis de velocidade para os potenciais HS e AI para o hélio (He) e o argônio (Ar).

$M_1$	$D_u$		
	HS	AI (He)	AI (Ar)
1,1	0,04001	0,03977	0,03949
2	0,2886	0,2589	0,2455
3	0,3855	0,3069	0,2905
4	0,4187	0,2972	0,2893
5	0,4337	0,2782	0,2792
6	0,4416	0,2590	0,2676
7	0,4462	0,2410	0,2561
8	0,4496	0,2249	0,2455
9	0,4515	0,2106	0,2357
10	0,4529	0,1976	0,2265

Tabela 8 – Inclinação máxima adimensional dos perfis de temperatura para os potenciais HS e AI para o hélio (He) e o argônio (Ar).

$M_1$	$D_T$		
	HS	AI (He)	AI (Ar)
1,1	0,04005	0,03997	0,03963
2	0,3090	0,2744	0,2588
3	0,4237	0,3302	0,3137
4	0,4673	0,3229	0,3167
5	0,4886	0,3036	0,3084
6	0,5009	0,2829	0,2966
7	0,5079	0,2634	0,2849
8	0,5124	0,2459	0,2729
9	0,5160	0,2301	0,2626
10	0,5179	0,2150	0,2522

argônio e 80% no hélio.

As Figuras 14 e 15 comparam a inclinação adimensional máxima dos perfis de densidade,  $D_\rho$ , em função do número de Mach  $M_1$ , para o argônio e para o hélio, com alguns resultados retirados da literatura. Resultados experimentais para o hélio são muito escassos, portanto, apenas comparações com resultados teóricos são apresentadas.

No argônio, os resultados experimentais de Alsmeyer [52] indicam uma inclinação máxima para  $M_1 = 3, 4$ . De acordo com os resultados da equação de Boltzmann para o potencial LJ [54],  $D_\rho$  é maior para  $M_1 = 4$ . Para o hélio, conforme os resultados do modelo bimodal para o potencial LJ [46] e das equações de Navier-Stokes [5], o máximo ocorre em  $M_1 = 5$ .

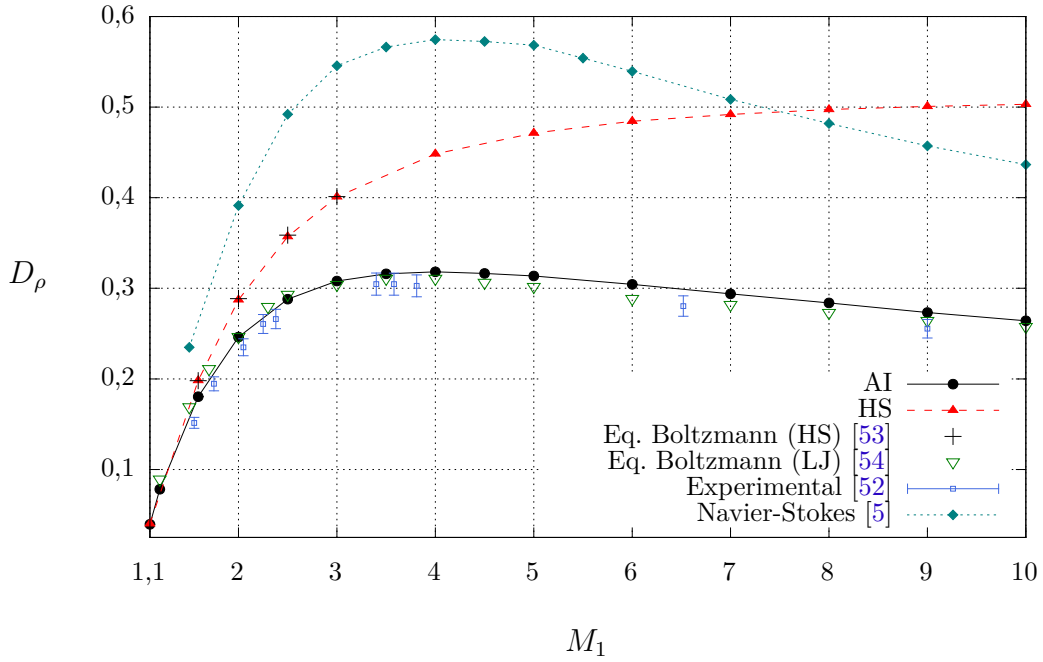


Figura 14 – Inclinação da curva de densidade,  $D_\rho$ , em função do número de Mach  $M_1$  para o argônio com base no potencial *ab initio* (AI) e para o potencial de esferas rígidas (HS).

A divergência entre os resultados obtidos para a inclinação  $D$  e os resultados da literatura  $D_0$ , é obtida através da expressão

$$\text{Divergência} = \frac{D - D_0}{D_0}. \quad (5.5)$$

Os resultados obtidos para o potencial HS apresentaram grande concordância com os resultados de Ohwada [53], obtidos através da solução da numérica da equação de Boltzmann, para o mesmo potencial. A divergência entre ambos os resultados não ultrapassa 0,5%. O potencial HS não exige a determinação do gás que está sendo simulado, portanto, para este potencial, as curvas das Figuras 14 e 15 são as mesmas.

Os resultados obtidos para  $D_\rho$  no argônio divergem dos resultados de Dodulad et al. [54] de 4% para  $M_1 = 5, 7, 8$  e 9, e 6% para  $M_1 = 6$ . Para os demais números de Mach, os resultados divergem de 3% ou menos, sendo que a precisão dos resultados, de acordo com os autores, não é menor que  $\pm 3\%$ .

Apesar dos números de Mach obtidos experimentalmente por Alsmeyer serem diferentes daqueles utilizados neste trabalho, pode-se avaliar que a concordância é melhor para números de Mach até 4, quando a divergência entre os resultados é de aproximadamente 4%. Para números de Mach maiores, a divergência fica entre 6% e 8%. De acordo com o autor a precisão dos seus resultados é de aproximadamente  $\pm 4\%$ .

Liepmann e Roshko [48] já haviam verificado que as discrepâncias entre resultados

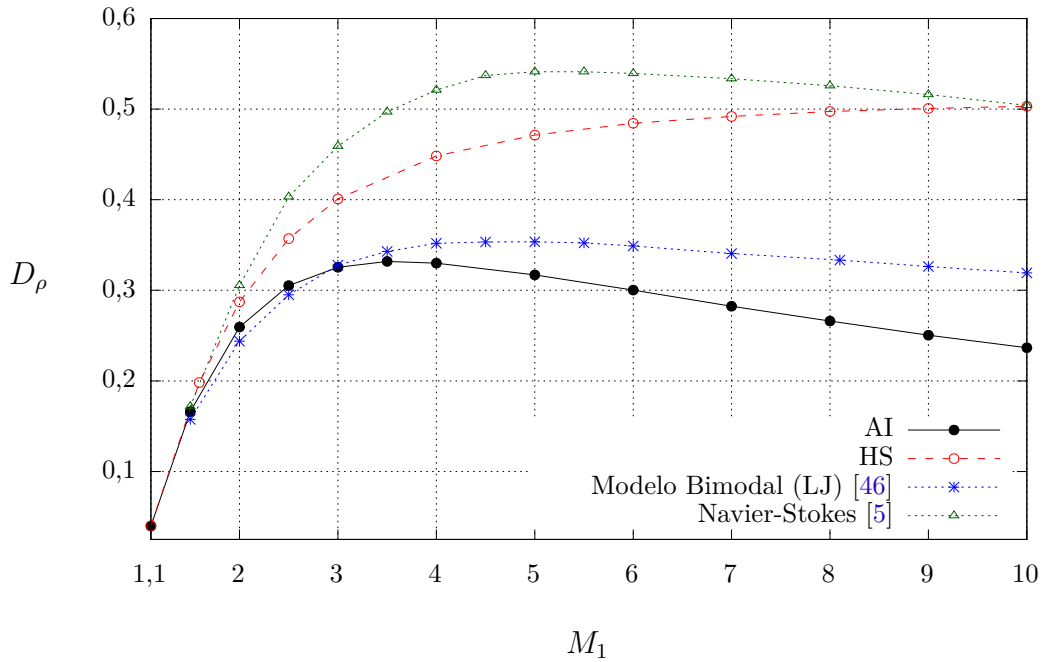


Figura 15 – Inclinação da curva de densidade,  $D_\rho$ , em função do número de Mach  $M_1$  para o hélio com base no potencial *ab initio* (AI) e para o potencial de esferas rígidas (HS).

experimentais e teóricos tendem a se tornar maiores conforme a intensidade do choque aumenta. Eles apontam as seguintes causas para este fenômeno: i) efeitos tridimensionais devido à ruptura do diafragma nos tubos de choque; ii) efeitos devido à viscosidade relacionados às paredes do tubo; iii) mudanças nas propriedades do gás a altas temperaturas.

Como esperado, os resultados obtidos a partir das equações de Navier-Stokes por Elizarova et al. [5], diferem significativamente dos resultados obtidos através do método DSMC em ambos os gases. A divergência para o argônio permanece em torno de 40% para todo o espectro de números de Mach, exceto para  $M_1 = 1,5$  quando a divergência é de 29%. Para o hélio, os resultados para o número de Mach igual a 1,5 divergem de apenas 3%, mas a divergência passa de aproximadamente 15%, quando  $M_1 = 2$ , até mais de 50%, quando  $M_1 = 10$ .

Os resultados de Muckenfuss [46] para o modelo bimodal com base no potencial LJ, apresentam maior concordância para números de Mach menores que 4. A melhor concordância ocorre para  $M_1 = 3$ , quando os resultados divergem de menos de 1%. A partir de  $M_1 = 4$  as curvas se afastam cada vez mais, chegando a uma divergência de aproximadamente 25% em  $M_1 = 10$ . Esses resultados confirmam que o modelo bimodal de Mott-Smith é melhor para números de Mach pequenos.

### 5.3 Análise de erros

Para cada conjunto de parâmetros foram feitas amostras de tamanhos suficientes para garantir um erro estatístico abaixo de 0,5%. Enquanto para  $M_1 = 10$  uma amostra composta por 5 elementos garante um erro em relação à média de 0,02%, para se obter um erro relativo de 0,1% com  $M_1 = 1, 1$  e  $10^6$  partículas, é preciso uma amostra com mais de 300 elementos. O tamanho das amostras necessário para atingir o erro desejado, portanto, diminui gradativamente conforme a intensidade do choque aumenta. Os erros relativos são iguais ou menores que 0,1% para todo o espectro de números de Mach.

Para cada parâmetro testado, os demais foram mantidos inalterados, de modo que a influência de cada parâmetro fosse testada isoladamente. Apenas comparações para a inclinação máxima das curvas de densidade são apresentadas, mas comparações para as inclinações  $D_u$  e  $D_T$  seguem as mesmas tendências observadas.

A diferença percentual entre dois valores de uma grandeza  $z$  qualquer, é obtida da seguinte forma,

$$\Delta z = \frac{|z_1 - z_2|}{\bar{z}} \times 100, \quad (5.6)$$

onde  $\bar{z}$  significa a média entre  $z_1$  e  $z_2$ , ou seja,  $\bar{z} = (z_1 + z_2)/2$ .

As Tabelas 9 e 10 mostram a diferença percentual entre os resultados para  $D_\rho$ , decorrente do uso de valores diferentes de  $N_E$  e  $N_b$  da matriz  $\chi$ , para o argônio e o hélio, respectivamente.

Tabela 9 – Influência do valor de  $N_b$  e  $N_E$ , para o argônio.

M	$E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1)$	$N_b$	$N_E$	$D_\rho$	$\Delta D_\rho$
4	95	900	2500	0,3185	0,10%
	200	500	4000	0,3182	
5	191	900	4000	0,3137	0,06%
	200	500	4000	0,3135	
6	191	900	4000	0,3042	0,09%
	200	500	4000	0,3044	
10	191	900	4000	0,2644	0,09%
	200	500	4000	0,2647	

Os cálculos para matrizes com o número de nós  $N_E$  e  $N_b$  diferentes, não apresentaram diferença dentro da dispersão estatística, mostrando que tem pouca influência sobre a incerteza total.

Foi avaliada também a influência da energia adimensional máxima para cada número de Mach, assim como o percentual de colisões com energia relativa maior do que  $E_{m\acute{a}x}$ , representado pela letra  $P$ . As Tabelas 11 e 12 trazem os resultados para o argônio e



Tabela 10 – Influência do valor de  $N_b$  e  $N_E$ , para o hélio.

M	$E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1)$	$N_b$	$N_E$	$D_\rho$	$\Delta D_\rho$
5	200	900	6000	0,3171	0,09%
	200	500	4000	0,3174	
8	200	900	6000	0,2658	0,07%
	200	500	4000	0,2659	
	250	500	5000	0,2659	0,009%
9	200	900	6000	0,2504	0,20%
	200	500	4000	0,2509	
	250	500	5000	0,2510	0,009%
10	200	900	6000	0,2368	0,15%
	200	500	4000	0,2372	
	250	500	5000	0,2370	0,07%

hélio, respectivamente. Para  $M_1 = 1, 1$  e  $2$  no argônio, a energia máxima  $E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1) = 57$  é suficiente, pois não houve colisões cuja energia relativa excedesse este valor. Para o hélio, a energia  $E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1) = 92$  foi suficiente para os números de Mach entre  $1, 1$  e  $3$ .

Na Tabela 12, o caso para o qual houve maior número de colisões nas quais o ângulo  $\chi$  não foi calculado corretamente, porque a energia relativa máxima das colisões foi superior ao valor estabelecido, foi para  $M_1 = 10$ , quando pelo menos  $0,3\%$  das colisões tinham energia relativa maior do que  $250 k_B T_1$ . No entanto, como mostra a tabela, o valor da inclinação  $D_\rho$  já havia convergido, tendo variado de menos de  $0,1\%$ , quando a energia era  $200 k_B T_1$  e  $1\%$  das colisões excedia a energia máxima. Logo, essa energia já é suficiente para obter resultados dentro da precisão de  $0,5\%$ .

A influência dos demais parâmetros do escoamento: número de partículas  $N$ , número de células  $NC$ , intervalo de tempo  $\Delta t$  e tamanho característico  $x/\ell$ , foram testadas e estão apresentadas nas Tabelas 13 a 16.

Tabela 11 – Influência do valor da energia adimensional máxima,  $E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1)$ , no valor da inclinação das curvas de densidade,  $D_\rho$ , para o argônio.

M	$E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1)$	$D_\rho$	$\Delta D_\rho$	P <sup>a</sup>
3	57	0,3080	0,08%	0,0002%
	95	0,3082		0%
4	57	0,3184	0,04%	0,06%
	95	0,3183		0,0001%
5	57	0,3139	0,04%	1%
	95	0,3137	0,05%	0,02%
	191	0,3136		0%
6	57	0,3053	0,2%	5%
	95	0,3047	0,1%	0,3%
	191	0,3044	0,01%	0,0002%
	286	0,3044		0%
7	57	0,2974	1%	13%
	95	0,2943	0,06%	2%
	191	0,2941	0,1%	0,009%
	286	0,2938		0%
8	57	0,2912	2%	24%
	95	0,2847	0,3%	6%
	191	0,2838	0,01%	0,1%
	286	0,2838		0,001%
9	57	0,2873	4%	35%
	95	0,2768	1%	12%
	191	0,2740	0,05%	0,5
	286	0,2738		0,02%
10	57	0,2852	5%	46%
	95	0,2702	2%	20%
	191	0,2644	0,05%	2%
	286	0,2645		0,1%

<sup>a</sup> P é o percentual de colisões com energia relativa maior do que  $E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1)$ .

Tabela 12 – Influência do valor da energia adimensional máxima,  $E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1)$ , no valor da inclinação das curvas de densidade,  $D_\rho$ , para o hélio.

M	$E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1)$	$D_\rho$	$\Delta D_\rho$	P <sup>a</sup>
4	92	0,3309	0,31%	0,0002%
	200	0,3299	0,002%	0%
	250	0,3299		0%
5	92	0,3183	0,41%	0,03%
	200	0,3171	0,05%	0%
	250	0,3171		0%
6	200	0,3000	0,09%	0,0001%
	250	0,3002		0%
7	200	0,2823	0,03%	0,005%
	250	0,2824		0,0003%
8	200	0,2657	0,09%	0,07%
	250	0,2660		0,007%
9	200	0,2509	0,03%	0,4%
	250	0,2509		0,07%
10	92	0,2467	4,1%	22%
	200	0,2368	0,07%	1%
	250	0,2372		0,3%

<sup>a</sup> P é o percentual de colisões com energia relativa maior do que  $E_{m\acute{a}x}/(k_B T_1)$ .

Tabela 13 – Influência do número de partículas,  $N$ , no valor da inclinação máxima das curvas de densidade,  $D_\rho$ .

$M_1$	$N$	Ar		He	
		$D_\rho$	$\Delta D_\rho$	$D_\rho$	$\Delta D_\rho$
1,1	$10^6$	0,05052	0,12%	0,04965	0,38%
	$10^7$	0,05046		0,04946	
2	$10^6$	0,2464	0,11%	0,2596	0,07%
	$10^7$	0,2461		0,2594	
3	$10^6$	0,3079	0,02%	0,3261	0,01%
	$10^7$	0,3080		0,3261	
4	$10^6$	0,3183	0,08%	0,3309	0,01%
	$10^7$	0,3181		0,3309	
5	$10^6$	0,3137	0,03%	0,3171	0,03%
	$10^7$	0,3136		0,3170	
6	$10^6$	0,3042	0,06%	0,3000	0,03%
	$10^7$	0,3044		0,3000	
10	$10^6$	0,2644	0,02%	0,2372	0,05%
	$10^7$	0,2644		0,2370	

Tabela 14 – Influência do número de células,  $NC$ , no valor da inclinação máxima das curvas de densidade,  $D_\rho$ .

$M_1$	$NC$	Ar		He	
		$D_\rho$	$\Delta D_\rho$	$D_\rho$	$\Delta D_\rho$
1, 1	1000	0,05052	0,10%	0,04946	0,14%
	2000	0,05047		0,4939	
2	1000	0,2464	0,10%	0,2596	0,14%
	2000	0,2467		0,2592	
3	1000	0,3079	0,09%	0,3261	0,06%
	2000	0,3082		0,3262	
4	1000	0,3183	0,03%	0,3309	0,07%
	2000	0,3182		0,3311	
5	1000	0,3137	0,005%	0,3170	0,01%
	2000	0,3136		0,3170	
6	1000	0,3042	0,05%	0,3000	0,07%
	2000	0,3043		0,2997	
10	1000	0,2644	0,03%	0,2372	0,05%
	2000	0,2644		0,2373	

Tabela 15 – Influência do intervalo de tempo adimensional,  $\Delta t$ , no valor da inclinação máxima das curvas de densidade,  $D_\rho$ .

$M_1$	$\Delta t$	Ar		He	
		$D_\rho$	$\Delta D_\rho$	$D_\rho$	$\Delta D_\rho$
1, 1	0,002	0,05052	0,27%	0,04965	0,30%
	0,0002	0,05065		0,04950	
2	0,002	0,2464	0,14%	0,2596	0,03%
	0,0002	0,2461		0,2597	
3	0,002	0,3079	0,04%	0,3261	0,13%
	0,0002	0,3078		0,3265	
4	0,002	0,3183	0,01%	0,3309	0,07%
	0,0002	0,3184		0,3312	
5	0,002	0,3137	0,05%	0,3171	0,06%
	0,0002	0,3138		0,3173	
6	0,002	0,3042	0,01%	0,3000	0,07%
	0,0002	0,3041		0,2998	
10	0,002	0,2644	0,04%	0,2372	0,08%
	0,0002	0,2645		0,2370	

Tabela 16 – Influência do tamanho adimensional característico do escoamento,  $x/\ell$ , no valor da inclinação máxima das curvas de densidade,  $D_\rho$ .

$M_1$	$x/\ell$	Ar		He	
		$D_\rho$	$\Delta D_\rho$	$D_\rho$	$\Delta D_\rho$
1, 1	40	0,05046	2,9%	-	-
	60	0,04903	0,13%	0,04946	0,45%
	80	0,04897		0,04924	
2	40	0,2461	0,003%	0,2594	0,04%
	60	0,2462		0,2593	
3	20	0,3080	0,05%	0,3261	0,08%
	40	0,3081		0,3258	
4	20	0,3181	0,08%	0,3309	0,03%
	40	0,3183		0,3308	
5	20	0,3136	0,01%	0,3170	0,03%
	40	0,3135		0,3171	
6	20	0,3044	0,09%	0,3000	0,07%
	40	0,3046		0,2997	
7	20	0,2938	0,13%	0,2824	0,04%
	40	0,2942		0,2823	
8	20	0,2938	0,07%	0,2658	0,08%
	40	0,2936		0,2660	
9	20	0,2738	0,19%	0,2504	0,21%
	40	0,2733		0,2510	
10	20	0,2645	0,17%	0,2366	0,18%
	40	0,2641		0,2370	

## 6 Conclusão

Neste trabalho, ondas de choque normais em gases monoatômicos não ionizados, foram modeladas através da simulação direta de Monte Carlo com base no potencial *ab initio*, para uma faixa de números de Mach entre 1,1 e 10. O parâmetro de referência obtido foi a inclinação adimensional máxima dos perfis das propriedades termodinâmicas do gás, fundamental para definir a validade de diferentes métodos em dinâmica dos gases.

O problema da estrutura de ondas de choque unidimensionais é considerado ideal para testar a acurácia de métodos numéricos [61]. Apesar de se tratar de um escoamento altamente fora do equilíbrio, sua configuração é bastante simples, pois possui apenas uma coordenada espacial, não possui interação com fronteiras sólidas e as condições dos escoamentos ao redor do choque, ou seja, as condições de Rankine-Hugoniot, são claramente definidas.

O uso das novas técnicas propostas na literatura, para implementação de potenciais arbitrários [9], como o potencial *ab initio*, na simulação direta de Monte Carlo, proporcionou que os resultados obtidos fossem independentes de dados extraídos de resultados experimentais, e que a simulação fosse realizada com um esforço computacional comparável ao necessário para simular potenciais mais simples, como o potencial de esferas rígidas. Os resultados numéricos podem ser utilizados para verificação de equações cinéticas modelo e novos métodos para resolver a equação de Boltzmann.

Os resultados apresentados nesta dissertação foram calculados com erro numérico de aproximadamente 0,1%, utilizando potenciais *ab initio* [14, 16], que possuem incerteza igual ou menor que 0,1%. Comparações com resultados experimentais disponíveis na literatura [52] para o argônio, apontam uma divergência de aproximadamente 4% para ondas de choque com número de Mach entre 1 e 4, e entre 6% e 8% para números de Mach maiores.

Comparações com resultados retirados da literatura [5] mostram, como esperado, que a estrutura das ondas de choque não são adequadamente descritas pela aproximação dos gases como meios contínuos, e que a teoria cinética da matéria deve ser utilizada. As equações de Navier-Stokes são geralmente consideradas válidas para ondas de choque com números de Mach menores que 2. Para Mach 1,5 as inclinações apresentam boa concordância no hélio, porém o mesmo não ocorre no argônio, quando mesmo nessa faixa de valores os desvios em relação aos perfis das ondas são significativos.

Resultados foram obtidos também para ondas de choque em um gás de esferas rígidas, mostrando que o potencial influencia profundamente nos resultados. Este potencial é adequado apenas para ondas de choque com números de Mach próximos a 1. Para

números de Mach significativamente maiores do que 1 os resultados apresentaram grande divergência dos resultados experimentais e *ab initio*. O modelo de esferas rígidas não deve ser aplicado a problemas que envolvam grandes variações de temperatura, como no estudo de ondas de choque.

Os perfis das propriedades termodinâmicas em uma onda de choque são sensíveis ao potencial de interação intermolecular e, portanto, potenciais realísticos devem ser utilizados. O potencial *ab initio* apresenta a vantagem de permitir cálculos totalmente teóricos, sem o uso de parâmetros ajustáveis. No entanto, estes potenciais ainda estão disponíveis para um número pequeno de gases e, na sua falta, o potencial de Lennard-Jones, ou ainda outro que capture a natureza real das interações intermoleculares, deve ser utilizado.

A simulação direta de Monte Carlo e as soluções numéricas da equação de Boltzmann são os métodos que garantem os resultados mais próximos aos resultados experimentais para a estrutura de ondas de choque na faixa de números de Mach analisados. Os resultados apresentados validam os métodos aproximativos utilizados na solução da equação de Boltzmann [54, 53].

Estudos futuros para ondas de choque em misturas de gases devem trazer novos resultados, já que resultados teóricos parecem divergir ainda mais nestes casos. Potenciais *ab initio* estão disponíveis para algumas misturas de gases nobres [13, 64], que podem ser implementadas no código desenvolvido no decorrer deste trabalho, com as necessárias modificações.

# Referências

- [1] P Krehl. History of shock waves. In G Ben-Dor, O Igra, and T Elperin, editors, *Handbook of shock waves*. Elsevier, 2001.
- [2] N Kunihiro. Shock waves in solids. In G Ben-Dor, O Igra, and T Elperin, editors, *Handbook of shock waves*. Elsevier, 2001.
- [3] P A Gnoffo. Planetary-entry gas dynamics. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 31:459–494, 1999.
- [4] D Gilbarg and D Paolucci. The structure of shock waves in the continuum theory of fluids. *J. Rat. Mech. Anal.*, 2:617–642, 1953.
- [5] T G Elizarova, I A Shirokov, and S Montero. Numerical simulation of shock-wave structure for argon and helium. *Phys. Fluids*, 17(6):068101, 2005.
- [6] R Morgan. Shock tubes and tunnels: facilities, instrumentation, and techniques. Free-piston driven expansion tubes. In G Ben-Dor, O Igra, and T Elperin, editors, *Handbook of shock waves*. Elsevier, 2008.
- [7] F Sharipov. Hypersonic flow of rarefied gas near the Brazilian satellite during its reentry into atmosphere. *Brazilian J. Phys.*, 33(2):398–405, 2003.
- [8] W F N Santos. Aerothermodynamic analysis of a reentry brazilian satellite. *Braz. J. Phys.*, 42:373–390, 2012.
- [9] F Sharipov and J L Strapasson. Direct simulation Monte Carlo method for an arbitrary intermolecular potential. *Phys. Fluids*, 24(1):011703.1–6, 2012.
- [10] F Sharipov and J L Strapasson. *Ab initio* simulation of transport phenomena in rarefied gases. *Phys. Rev. E*, 86(3):031130, 2012.
- [11] B Jäger, R Hellmann, E Bich, and E Vogel. Ab initio pair potential energy curve for the argon atom pair and thermophysical properties of the dilute argon gas. I. Argon-argon interatomic potential and rovibrational spectra. *Mol. Phys.*, 107(20):2181–2188, 2009. Correction in Vol.108, 105 (2010).
- [12] R Hellmann, E Bich, and E Vogel. Ab initio potential energy curve for the helium atom pair and thermophysical properties of dilute helium gas. I. Helium-helium interatomic potential. *Mol. Phys.*, 105(23-24):3013–3023, 2007.



- [13] S M Cybulski and R R Toczyłowski. Ground state potential energy curves for He<sub>2</sub>, Ne<sub>2</sub>, Ar<sub>2</sub>, He-Ne, He-Ar, and Ne-Ar: A coupled-cluster study. *J. Chem. Phys.*, 111(23):10520–10528, 1999.
- [14] E Bich, R Hellmann, and E Vogel. Ab initio potential energy curve for the helium atom pair and thermophysical properties of the dilute helium gas. II. Thermophysical standard values for low-density helium. *Mol. Phys.*, 105(23-24):3035–3049, 2007.
- [15] E Bich, R Hellmann, and E Vogel. Ab initio potential energy curve for the neon atom pair and thermophysical properties for the dilute neon gas. II. Thermophysical properties for low-density neon. *Mol. Phys.*, 106(6):813–825, 2008.
- [16] E Vogel, B Jaeger, R Hellmann, and E Bich. Ab initio pair potential energy curve for the argon atom pair and thermophysical properties for the dilute argon gas. II. Thermophysical properties for low-density argon. *Mol. Phys.*, 108(24):3335–3352, 2010.
- [17] L D Landau and E M Lifshitz. *Fluid Mechanics*. Pergamon, New York, 1989.
- [18] Y B Zeldovich and Y P Raizer. *Physics of shock waves and high temperature hydrodynamic phenomena*. Dover Publications Inc, New York, 2002.
- [19] A H Shapiro. *The dynamics and thermodynamics of compressible fluid flow*. The Ronald Press Company, New York, 1953.
- [20] F Sharipov. *Rarefied Gas Dynamics. Fundamentals for Research and Practice*. Wiley-VCH, Berlin, 2016.
- [21] L C Woods. *An introduction to the kinetic theory of gases and magnetoplasmas*. Oxford University Press, New York, 1993.
- [22] W J M Rankine. On the thermodynamic theory of waves of finite longitudinal disturbance. *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, 160:277–288, 1870.
- [23] P H Hugoniot. Sur la propagation du mouvement dans les corps et spécialement dans les gaz parfaits. *J. École Polytech.*, 58:1–125, 1889.
- [24] T I Gombosi. *Gaskinetic theory*. Cambridge University Press, Cambridge, 1994.
- [25] National Institute of Standards and Technology - atomic spectra database ionization energies form. Disponível em: <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/ionEnergy.html>. Acesso em: 29 set. 2015.
- [26] G A Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford University Press, Oxford, 1994.

- 
- [27] G M Kremer. *Uma introdução à equação de Boltzmann*. Edusp, São Paulo, 2005.
- [28] W G Vincenti and C H Kruger Jr. *Introduction to physical gas dynamics*. Krieger Publishing Company, Florida, 1986.
- [29] J H Ferziger and H G Kaper. *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1972.
- [30] S Chapman and T G Cowling. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. University Press, Cambridge, 1952.
- [31] J Kestin, K Knierim, E A Mason, B Najafi, S T Ro, and M Waldman. Equilibrium and transport properties of the noble gases and their mixture at low densities. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 13(1):229–303, 1984.
- [32] V J Benites. *Cálculo de coeficientes de transporte com base no potencial ab initio*. Dissertação (Mestrado) - Pós Graduação em Física, UFPR, [http://fisica.ufpr.br/sharipov/benedites\\_dis.pdf](http://fisica.ufpr.br/sharipov/benedites_dis.pdf), fevereiro 2015.
- [33] P L Bhatnagar, E P Gross, and M A Krook. A model for collision processes in gases. *Phys. Rev.*, 94:511–525, 1954.
- [34] E M Shakhov. Generalization of the Krook kinetic relaxation equation. *Fluid Dynamics*, 3(5):95–96, 1968.
- [35] R B Bird, W E Stewart, and E N Lightfoot. *Transport Phenomena*. John Wiley, New York, 1960.
- [36] E L Tipton, R V Tompson, and S K Loyalka. Chapman-Enskog solutions to arbitrary order in Sonine polynomials II: Viscosity in a binary, rigid-sphere, gas mixture. *Eur. J. Mech. B-Fluids*, 28(3):335–352, 2009.
- [37] K Koura and H Matsumoto. Variable soft sphere molecular-model for inverse-power-law of Lennard-Jones potential. *Phys. Fluids*, 3(10):2459–2465, 1991.
- [38] J O Hirschfelder, C F Curtiss, and R B Bird. *The Molecular Theory of Gases and Liquids*. Wiley, New York, 1954.
- [39] K T Tang and J P Toennies. An improved simple model for the van der waals potential based on universal damping functions for the dispersion coefficients. *J. Chem. Phys.*, 80(8):3726–3741, 1984.
- [40] Herbert Goldstein. *Classical mechanics*. Addison-Wesley, 1980.
- [41] F Sharipov and G Bertoldo. Numerical solution of the linearized Boltzmann equation for an arbitrary intermolecular potential. *J. Comp. Phys.*, 228(9):3345–3357, 2009.

- [42] M D Salas. The curious events leading to the theory of shock waves. *J. Shock Waves*, 16(6):477–487, 2007.
- [43] G Ben-Dor, O Igra, and T Elperin, editors. *Handbook of shock waves*. Elsevier, 2000.
- [44] L Rayleigh. Aerial plane waves of finite amplitude. *Proc. Roy. Soc. Lond.*, A84:247–284, 1910.
- [45] H M Mottsmith. The solution of the Boltzmann equation for a shock wave. *Phys. Rev.*, 82(6):885–892, 1951.
- [46] C Muckenfuss. Some aspects of shock structure according to the bimodal model. *Phys. Fluids*, 5(11):1325–1336, 1962.
- [47] M Linzer and D F Hornig. The structure of shock fronts in argon and nitrogen. Technical report, Princeton University, April 1963.
- [48] H W Liepmann, R Narasimha, and M T Chahine. Structure of a plane shock layer. *Phys. Fluids*, 5(11):1313–1324, 1962.
- [49] L Talbot and F S Sherman. Structure of weak shock waves in a monatomic gas. Technical report, NASA, 1959.
- [50] G A Bird. Aspects of the structure of strong shock waves. *Phys. Fluids*, 13(5):1172–1177, 1970.
- [51] B Schmidt. Electron beam density measurements in shock waves in argon. *J. Fluid Mech.*, 39(2):361–373, 1969.
- [52] H Alsmeyer. Density profiles in argon and nitrogen shock waves measured by absorption of an electron beam. *J. Fluid Mech.*, 74(6):497–513, 1976.
- [53] T Ohwada. Structure of normal shock waves: direct numerical analysis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules. *Phys. Fluids A*, 5(1):217–234, 1993.
- [54] O I Dodulad and F G Tcheremissine. Computation of a shock wave structure in monatomic gas with accuracy control. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 53:827–844, 2013.
- [55] W Bleakney, D K Weimer, and C H Fletcher. The shock tube: A facility for investigations in fluid dynamics. *Rev. Sci. Instrum.*, 20(11):807–815, 1949.
- [56] G R Cowan and D F Hornig. The experimental determination of the thickness of a shock front in a gas. *J. Chem. Phys.*, 18(8):1008–1018, 1950.
- [57] E F Greene, G R Cowan, and D F Hornig. The thickness of shock fronts in argon and nitrogen and rotational heat capacity lags. *J. Chem. Phys.*, 19(4):427–434, 1951.

- 
- [58] F Robben and L Talbot. Measurement of shock wave thickness by the electron beam fluorescence method. *Phys. Fluids*, 9(4):633–643, 1966.
- [59] F Sharipov and J L Strapasson. *Ab initio* simulation of rarefied gas flow through a thin orifice. *Vacuum*, 109:246–252, 2014.
- [60] C Cercignani and S Cortese. Validation of a Monte Carlo simulation of the plane Couette flow of a rarefied gas. *J.Stat.Phys.*, 75(5/6):817–838, 1994.
- [61] C Cercignani, A Frezzotti, and P Grosfils. The structure of an infinitely strong shock wave. *Phys. Fluids*, 11(9):2757–2764, 1999.
- [62] J L Strapasson. *Implementação de potenciais arbitrários na simulação direta de Monte Carlo*. Tese (Doutorado) - Pós Graduação em Física, UFPR, [http://fisica.ufpr.br/sharipov/Strapasson\\_tese.pdf](http://fisica.ufpr.br/sharipov/Strapasson_tese.pdf), julho 2015.
- [63] M Naghettini and E J A Pinto. *Hidrologia estatística*. CPRM, Belo Horizonte, 2007.
- [64] P Slavíček, R Kalus, P Paška, I Odvárková, P Hobza, and A Malijevský. State-of-the-art correlated ab initio potential energy curves for heavy rare gas dimers: Ar<sub>2</sub>, Kr<sub>2</sub>, and Xe<sub>2</sub>. *J. Chem. Phys.*, 119(4):2102–2119, 2003.

# APÊNDICE A – Resultados numéricos

As Tabelas 17 a 19 apresentam alguns resultados numéricos obtidos neste trabalho para as propriedades termodinâmicas do gás através da onda de choque, para o potencial de esferas rígidas e para o argônio com base no potencial *ab initio*. Os dados apresentados foram utilizados para obter alguns dos perfis apresentados nas Figuras 10, 11 e 12.

Tabela 17 – Propriedades termodinâmicas através da onda de choque para  $M_1 = 2$ , para as potencias de esferas rígidas (HS) e *ab initio* (AI) para o argônio.

$x/\ell$	AI			HS		
	$\rho/\rho_1$	$u/v_{mp}$	$T/T_1$	$\rho/\rho_1$	$u/v_{mp}$	$T/T_1$
-20	1,0000	1,8257	1,0000	1,0000	1,8257	1,0000
-19	1,0000	1,8258	0,9999	0,9998	1,8260	0,9996
-18	0,9999	1,8259	0,9997	0,9997	1,8263	0,9993
-17	1,0000	1,8258	0,9998	0,9999	1,8258	0,9999
-16	0,9998	1,8260	0,9996	1,0000	1,8257	0,9998
-15	0,9999	1,8258	0,9999	0,9999	1,8258	0,9997
-14	0,9999	1,8259	0,9997	1,0000	1,8257	0,9999
-13	1,0000	1,8257	1,0001	1,0000	1,8257	0,9997
-12	1,0000	1,8257	1,0000	1,0001	1,8256	1,0000
-11	1,0002	1,8254	1,0002	1,0001	1,8256	1,0001
-10	1,0000	1,8257	1,0001	1,0001	1,8256	1,0000
-9	1,0003	1,8251	1,0008	1,0000	1,8257	1,0000
-8	1,0008	1,8243	1,0025	1,0001	1,8255	1,0003
-7	1,0021	1,8220	1,0060	1,0003	1,8251	1,0010
-6	1,0047	1,8171	1,0145	1,0013	1,8233	1,0041
-5	1,0112	1,8054	1,0343	1,0043	1,8178	1,0132
-4	1,0275	1,7768	1,0814	1,0133	1,8018	1,0395
-3	1,0669	1,7111	1,1854	1,0402	1,7551	1,1149
-2	1,1603	1,5733	1,3845	1,1193	1,6309	1,3011
-1	1,3517	1,3505	1,6564	1,3155	1,3876	1,6125
0	1,6447	1,1097	0,5015	1,6515	1,1052	1,8863
1	1,9468	0,9373	2,0066	1,9892	0,9175	2,0198
2	2,1301	0,8565	2,0529	2,1693	0,8412	2,0620
3	2,2184	0,8223	2,0716	2,2431	0,8133	2,0752
4	2,2561	0,8084	2,0771	2,2688	0,8040	2,0792
5	2,2710	0,8030	2,0795	2,2788	0,8003	2,0800

Tabela 17 – Continuação.

$x/\ell$	AI			HS		
	$\rho/\rho_1$	$u/v_{mp}$	$T/T_1$	$\rho/\rho_1$	$u/v_{mp}$	$T/T_1$
6	2,2775	0,8007	2,0804	2,2819	0,7992	2,0806
7	2,2807	0,7995	2,0802	2,2828	0,7988	2,0801
8	2,2818	0,7992	2,0798	2,2840	0,7985	2,0797
9	2,2838	0,7986	2,0796	2,2843	0,7985	2,0802
10	2,2841	0,7986	2,0796	2,2844	0,7985	2,0793
11	2,2846	0,7985	2,0792	2,2857	0,7982	2,0788
12	2,2856	0,7983	2,0788	2,2848	0,7986	2,0792
13	2,2853	0,7985	2,0787	2,2866	0,7980	2,0792
14	2,2856	0,7984	2,0783	2,2857	0,7983	2,0788
15	2,2848	0,7987	2,0786	2,2855	0,7984	2,0784
16	2,2852	0,7986	2,0783	2,2852	0,7985	2,0783
17	2,2846	0,7988	2,0780	2,2851	0,7986	2,0786
18	2,2856	0,7984	2,0778	2,2845	0,7988	2,0785
19	2,2852	0,7986	2,0782	2,2853	0,7986	2,0786
20	2,2857	0,7988	2,0781	2,2857	0,7988	2,0781

Tabela 18 – Propriedades termodinâmicas através da onda de choque para  $M_1 = 5$ , para os potencias de esferas rígidas (HS) e *ab initio* (AI) para o argônio.

$x/\ell$	AI			HS		
	$\rho/\rho_1$	$u/v_{mp}$	$T/T_1$	$\rho/\rho_1$	$u/v_{mp}$	$T/T_1$
-10,0	1,0000	4,5644	1,0000	1,0000	4,5644	1,0000
-9,5	1,0002	4,5629	1,0076	1,0000	4,5643	1,0001
-9,0	1,0005	4,5619	1,0128	1,0000	4,5643	1,0001
-8,5	1,0008	4,5604	1,0199	1,0000	4,5643	1,0002
-8,0	1,0013	4,5583	1,0304	1,0000	4,5642	1,0005
-7,5	1,0020	4,5551	1,0459	1,0000	4,5641	1,0010
-7,0	1,0030	4,5503	1,0690	1,0001	4,5639	1,0021
-6,5	1,0047	4,5431	1,1038	1,0002	4,5635	1,0038
-6,0	1,0070	4,5324	1,1548	1,0003	4,5628	1,0074
-5,5	1,0106	4,5162	1,2320	1,0006	4,5613	1,0142
-5,0	1,0161	4,4918	1,3467	1,0012	4,5586	1,0276
-4,5	1,0245	4,4548	1,5192	1,0024	4,5532	1,0533
-4,0	1,0375	4,3989	1,7741	1,0049	4,5423	1,1050
-3,5	1,0579	4,3143	2,1513	1,0096	4,5210	1,2045
-3,0	1,0897	4,1884	2,6917	1,0192	4,4785	1,4011
-2,5	1,1401	4,0031	3,4427	1,0388	4,3940	1,7830

Tabela 18 – Continuação.

$x/\ell$	AI			HS		
	$\rho/\rho_1$	$u/v_{mp}$	$T/T_1$	$\rho/\rho_1$	$u/v_{mp}$	$T/T_1$
-2,0	1,2199	3,7413	4,4174	1,0796	4,2277	2,5024
-1,5	1,3453	3,3927	5,5593	1,1650	3,9177	3,7366
-1,0	1,5379	2,9678	6,7149	1,3411	3,4033	5,4839
-0,5	2,1798	2,5120	7,6660	1,6781	2,7198	7,2293
0	1,8169	2,0939	8,2731	2,2091	2,0661	8,2854
0,5	2,5951	1,7588	8,5765	2,8156	1,6210	8,6517
1,0	2,9503	1,5471	8,6833	3,2248	3,2248	8,7137
1,5	3,2095	1,4222	8,7104	3,4303	3,4303	8,7084
2,0	3,3721	1,3536	8,7109	3,5160	3,5160	8,6970
2,5	3,4642	1,3176	8,7053	3,5494	3,5494	8,6889
3,0	3,5144	1,2988	8,6978	3,5630	3,5630	8,6840
3,5	3,5408	1,2891	8,6934	3,5684	3,5684	8,6822
4,0	3,5545	1,2841	8,6887	3,5698	3,5698	8,6818
4,5	3,5620	1,2814	8,6849	3,5700	3,5700	8,6818
5,0	3,5654	1,2802	8,6839	3,5711	3,5711	8,6805
5,5	3,5680	1,2793	8,6825	3,5712	3,5712	8,6812
6,0	3,5689	1,2789	8,6818	3,5714	3,5714	8,6803
6,5	3,5697	1,2786	8,6821	3,5713	3,5713	8,6805
7,0	3,5700	1,2784	8,6815	3,5709	3,5709	8,6801
7,5	3,5706	1,2782	8,6809	3,5710	3,5710	8,6800
8,0	3,5704	1,2783	8,6817	3,5708	3,5708	8,6806
8,5	3,5703	1,2783	8,6821	3,5708	3,5708	8,6813
9,0	3,5706	1,2781	8,6813	3,5709	3,5709	8,6809
9,5	3,5704	1,2781	8,6812	3,5711	3,5711	8,6805
10,0	3,5714	1,2780	8,6800	3,5714	1,2780	8,6800

Tabela 19 – Propriedades termodinâmicas através da onda de choque para  $M_1 = 10$ , para os potencias de esferas rígidas (HS) e *ab initio* (AI) para o argônio.

$x/\ell$	AI			HS		
	$\rho/\rho_1$	$u/v_{mp}$	$T/T_1$	$\rho/\rho_1$	$u/v_{mp}$	$T/T_1$
-20	1,0000	9,1287	1,0000	1,0000	9,1287	1,0000
-19	0,9999	9,1287	1,0007	0,9999	9,1288	0,9999
-18	1,0000	9,1286	1,0013	1,0000	9,1288	0,9999
-17	1,0000	9,1285	1,0024	1,0000	9,1289	0,9999
-16	1,0000	9,1283	1,0047	0,9999	9,1289	0,9999
-15	1,0000	9,1280	1,0083	1,0000	9,1288	0,9999

Tabela 19 – Continuação.

$x/\ell$	AI			HS		
	$\rho/\rho_1$	$u/v_{mp}$	$T/T_1$	$\rho/\rho_1$	$u/v_{mp}$	$T/T_1$
-14	1,0001	9,1273	1,0147	1,0000	9,1288	0,9999
-13	1,0003	9,1262	1,0260	0,9999	9,1288	1,0000
-12	1,0005	9,1240	1,0477	1,0000	9,1288	1,0000
-11	1,0009	9,1203	1,0842	0,9999	9,1288	1,0000
-10	1,0017	9,1134	1,1538	0,9999	9,1288	1,0001
-9	1,0031	9,1003	1,2820	0,9999	9,1288	1,0004
-8	1,0058	9,0758	1,5236	1,0000	9,1286	1,0018
-7	1,0110	9,0291	1,9764	1,0001	9,1282	1,0065
-6	1,0210	8,9405	2,8248	1,0002	9,1262	1,0254
-5	1,0408	8,7706	4,4112	1,0010	9,1192	1,0940
-4	1,0806	8,4473	7,3009	1,0041	9,0906	1,3692
-3	1,1626	7,8518	12,2065	1,0173	8,9735	2,4788
-2	1,3349	6,8379	19,3208	1,0745	8,4955	6,7748
-1	1,6863	5,4127	26,7631	1,3369	6,8281	19,1419
0	2,3022	3,9646	31,2221	2,3064	3,9578	31,1131
1	3,0533	2,9895	0,4516	3,5226	2,5913	32,3956
2	3,5555	2,5670	32,3968	3,8360	2,3796	32,1998
3	3,7708	2,4203	32,3883	3,8772	2,3543	32,1354
4	3,8456	2,3733	32,2702	3,8810	2,3521	32,1307
5	3,8705	2,3580	32,1921	3,8831	2,3508	32,1233
6	3,8783	2,3533	32,1582	3,8833	2,3507	32,1236
7	3,8817	2,3513	32,1439	3,8831	2,3510	32,1214
8	3,8830	2,3505	32,1332	3,8841	2,3502	32,1260
9	3,8823	2,3509	32,1278	3,8840	2,3504	32,1199
10	3,8837	2,3501	32,1317	3,8845	2,3501	32,1186
11	3,8829	2,3507	32,1254	3,8832	2,3508	32,1179
12	3,8840	2,3499	32,1279	3,8839	2,3505	32,1204
13	3,8829	2,3504	32,1297	3,8834	2,3508	32,1235
14	3,8837	2,3500	32,1283	3,8838	2,3506	32,1232
15	3,8825	2,3507	32,1239	3,8827	2,3513	32,1165
16	3,8832	2,3503	32,1290	3,8829	2,3511	32,1298
17	3,8823	2,3508	32,1223	3,8840	2,3506	32,1219
18	3,8822	2,3509	32,1297	3,8833	2,3508	32,1204
19	3,8828	2,3506	32,1292	3,8837	2,3507	32,1202
20	3,8835	2,3506	32,1231	3,8835	2,3506	32,1231